

ICH-FC
1AG-F
2741
1



Desorden, no linealidad variable y modos de superficie en condensados de Bose-Einstein

Tesis
entregada a la
Universidad de Chile
en cumplimiento parcial de los requisitos
para optar al grado de
Magíster en Ciencias con mención en Física
Facultad de Ciencias

por

Santiago Rojas Rojas

Octubre, 2012

Director de Tesis: **Dr. Rodrigo A. Vicencio**

FACULTAD DE CIENCIAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

INFORME DE APROBACIÓN
TESIS DE MAGÍSTER

Se informa a la Escuela de Postgrado de la Facultad de Ciencias que la Tesis de Magíster presentada por el candidato

Santiago Rojas Rojas

ha sido aprobada por la Comisión de Evaluación de la Tesis como requisito para optar al grado de Magíster en Ciencias Físicas, en el examen de Defensa de Tesis rendido el día 9 de Mayo de 2012.

Director de Tesis

Dr. Rodrigo A. Vicencio

Comisión de Evaluación de la Tesis

Dr. Aldo Delgado

Dr. Mario Molina (Presidente)

Dr. Luis Morales-Molina



[Handwritten signature]

[Handwritten signature]

AGRADECIMIENTOS

Deseo agradecer a todos quienes tuvieron algo que ver con que esta tesis llegara a buen término, especialmente al Grupo de Óptica no Lineal de la Universidad de Chile, cuyos miembros han acogido con entusiasmo el desarrollo de mi incipiente carrera de investigador. El apoyo recibido de parte de los profesores Rodrigo Vicencio y Mario Molina, así como de mis compañeros Alejandro Martínez y Uta Naether, ha sido una contribución invaluable al presente trabajo. Quiero mencionar también al profesor Jaime Roessler, cuya incansable vocación por compartir su conocimiento, ha enriquecido enormemente mi comprensión e interés por la física.

Mi permanencia en el programa de magíster fue posible gracias al Centro de Óptica y Fotónica, financiado a su vez por CONICYT a través del proyecto Basal No. FB0824/2008. Además, este trabajo ha sido parcialmente financiado por FONDECYT, proyectos No. 1070897 y 1110142.

Índice

1. Introducción	1
1.1. Sistemas ópticos y solitones discretos.	4
1.2. Condensados de Bose-Einstein dipolares.	5
1.3. Sistemas desordenados	7
2. Potenciales periódicos	11
2.1. Descripción general. Teoría de campo medio.	12
2.2. Trampas ópticas.	15
2.3. Potencial periódico. Redes ópticas.	16
2.4. Autoestados de un BEC con potencial periódico. Sistema lineal.	18
2.5. Límite de potencial profundo. Funciones de Wannier.	21
2.6. Discretización del modelo. Ecuación discreta lineal de Schroedinger.	24
3. Interacciones atómicas	26
3.1. Interacción de contacto. Ecuación de Gross-Pitaevskii	27
3.2. Manipulación de la interacción de contacto. Resonancias de Feshbach	30
3.3. Interacción dipolar.	34
3.4. Interacciones no locales. Planteamiento general.	37

3.5. Consideraciones generales sobre la DNLS, sus soluciones y otros modelos relacionados.	40
3.5.1. Cantidades conservadas y estabilidad.	40
3.5.2. Clasificación de las soluciones localizadas.	42
3.5.3. Generalizaciones de la DNLS.	43
4. Soluciones localizadas en un condensado dipolar	47
4.1. Generalidades.	48
4.1.1. Modelo.	48
4.1.2. Inestabilidad modulacional.	49
4.2. Soluciones localizadas discretas no lineales.	51
4.2.1. Método.	52
4.2.2. Efecto de la interacción dipolar repulsiva ($g > 0$).	53
4.3. Estabilidad lineal.	54
4.4. Método del constraint.	58
4.5. Interacción dipolar atractiva ($g < 0$).	60
4.6. Aproximación de modos fuertemente localizados.	63
4.7. Modos de superficie.	66
4.8. Conclusiones.	69
5. Desorden y no linealidad	72
5.1. Modelo.	74
5.2. Modos lineales.	75
5.3. Difusión lineal.	79
5.4. Difusión no lineal. q fijo.	82
5.5. Difusión no lineal. q variable.	86

	VI
5.6. Conclusiones.	90
Conclusiones finales	93
A. Apéndice	96

RESUMEN

En esta tesis se estudia la dinámica de un condensado de Bose-Einstein atrapado en una red óptica. Nuestro objetivo principal es encontrar y caracterizar estados localizados que existen en estos sistemas. Consideramos dos elementos que facilitan la localización, a saber, los efectos no lineales surgidos de las interacciones atómicas, y/o localización de Anderson inducida por desorden. El modelo utilizado es un sistema discreto que permite expresar las magnitudes físicas involucradas en este estudio en términos de unos pocos parámetros. A través de análisis numéricos obtenemos un cuadro completo, dentro del cual las propiedades de las soluciones localizadas se relacionan claramente con la fenomenología propia del sistema.

ABSTRACT

In this thesis, the dynamics of a Bose-Einstein condensate trapped in an optical lattice is studied. Our main goal is to find and characterize localized solutions that exist in these systems. Two elements that lead to localization are considered, namely, nonlinear effects provided by atomic interactions and Anderson localization induced by disorder. We study this problem by using a discrete model that allow us to express most of the relevant physical magnitudes involved in this work in terms of few parameters. By means of numerical analysis, we obtain a complete picture within which the properties of localized solutions are clearly related to the system phenomenology.

Capítulo 1

Introducción

A partir de la segunda mitad del siglo XX, los sistemas no lineales en general y, dentro de éstos, los modelos discretos han tenido gran influencia en muchas áreas de la ciencia. Los célebres *experimentos numéricos* de Fermi, Pasta y Ulam llevados a cabo en 1953 fueron el origen del renovado interés por cadenas o redes de partículas que presentan interacciones no lineales. La contradicción entre las predicciones y los resultados (Fermi esperaba que la no linealidad llevara a una suerte de *termalización* del sistema, pero sus resultados no mostraron ningún comportamiento caótico [1]) llevó a otros investigadores a relacionar los sistemas discretos no lineales con modelos continuos conocidos que sustentaban la existencia de *solitones*, esto es, paquetes de onda localizados que son solución de ecuaciones de onda no lineales, y que permanecen invariantes al propagarse o al evolucionar el sistema completo [2]. Por otra parte, diversos trabajos evidenciaron que algunos sistemas físicos en que los efectos no lineales determinan visiblemente la dinámica pueden ser considerados discretos en cierto régimen. La interacción entre discretitud y no linealidad lleva, en estos casos, a una interesante y novedosa fenomenología [3–5]. Uno de los modelos más exitosos para describir tales sistemas es la ecuación de Schroedinger no lineal discreta (DNLS en adelante), ocupada por primera vez en un contexto biológico, para describir la contracción de proteínas [6]. Su relevancia se ha visto incrementada en las últimas décadas, no sólo por la gran cantidad de predicciones teóricas que permitió realizar — que incluyen fenómenos tales como solitones discretos, difracción discreta y barreras de Peierls-Nabarro; sino también por la posibilidad de comprobar dichas predicciones experimentalmente [7]. Los principales sistemas físicos que han sido descritos exitosamente por la DNLS son los arreglos de guías de ondas y, posteriormente, los condensados de Bose-Einstein (BECs en adelante) sobre los que actúa un potencial óptico externo. A través de la discretización, ambos medios pueden ser entendidos

como un arreglo o red a cuyos sitios (nodos) corresponde una determinada amplitud de la función de onda que describe el sistema. Existe un grado de interacción entre los sitios, que en la forma estándar de la DNLS está dado por acoplamiento a primeros vecinos (en correspondencia con el modelo de estado sólido conocido como *tight-binding*). Además, la DNLS comprende un término que da cuenta de la respuesta no lineal del medio, y cuya dependencia en la amplitud de la onda puede variar según el modelo y sistema físico en particular [8].

Entonces, el sistema que consideramos en nuestro caso es discreto espacialmente: un arreglo de sitios con posición bien definida en que la función de onda que describe el sistema tiene una cierta amplitud tiempo-dependiente. Si bien esto también implica una discretización del espectro de autofrecuencias o autoenergías, la principal consecuencia de la discretitud espacial sobre la localización de excitaciones se da a través de la formación de bandas de energía (o frecuencia). Por otra parte, la no linealidad en nuestro sistema puede describirse a través de la evolución de ondas, que, en principio, no pueden tener forma arbitraria y al mismo tiempo propagarse con velocidad definida: el principio de superposición deja de ser válido. En medios ópticos, esto corresponde a una relación entre la polarización y el cuadrado del campo eléctrico, que se traduce en una modificación no lineal del índice de refracción (efecto Kerr).

La existencia de estados localizados en sistemas discretos no lineales es de gran importancia por la aplicación que podría tener en el desarrollo de tecnologías de información y comunicaciones. La caracterización de soluciones localizadas estacionarias (*breathers* discretos) o móviles (solitones discretos) ha sido realizada desde diversos enfoques analíticos, numéricos y experimentales. No obstante, el descubrimiento de nuevas formas de respuesta no lineal, así como la inclusión de otros factores que favo-

recen la localización, hace que la determinación de las condiciones para la existencia y estabilidad de soluciones localizadas, así como su manipulación, sea todavía un campo muy amplio de investigación.

1.1. Sistemas ópticos y solitones discretos.

La idea de implementar sistemas discretos con componentes ópticos empezó a tomar forma desde mediados de los años sesenta. Dentro de las posibilidades concretas para este propósito, los arreglos de guías de onda evanescentes aparecían como la más factible. Esto se vio favorecido por distintos trabajos teóricos sobre la propagación de luz en tales medios [9], que pusieron de manifiesto la interesante dinámica surgida del confinamiento de luz en las guías y del intercambio de energía entre ellas debido al acoplamiento. Estas propiedades son causa de que al inyectar luz en una de las guías, se produzca la llamada *difracción discreta*, observada experimentalmente por primera vez en 1973 [10], y que no tiene correspondencia con la dispersión de la luz en un medio continuo: en un sistema discreto, la luz se concentra en dos lóbulos alejados de la guía inicial, a diferencia de un sistema continuo, en que el perfil dispersivo presenta siempre mayor intensidad en el sitio donde la luz es inyectada.

En la década de los ochenta, el estudio teórico de los arreglos de guías de onda tomó otra dirección con el estudio de Christodoulides y Joseph [11] en que se exploró por primera vez la posibilidad de observar solitones discretos e inestabilidad modulacional en arreglos *tipo Kerr* en que la no linealidad juega un rol determinante. El proceso de formación de solitones en estas estructuras puede entenderse como el balance entre la no linealidad local y la difracción discreta, que mantiene la luz confinada a unas pocas guías mientras se propaga. La localización se debe a la modificación del índice de refracción inducida por el mismo haz de luz, por lo cual

es referida en este contexto como *autoenfoque*. Desde esta perspectiva, los solitones discretos son entendidos en ocasiones como *defectos no lineales*, ya que la constante de propagación de la guía en que se concentra el haz de luz cambia también. (Es importante destacar que los solitones discretos son una excitación colectiva del arreglo no lineal como un todo, por lo que no tienen un análogo exacto en sistemas continuos [12].) En [11] también se mostró que la fenomenología de los arreglos no lineales puede describirse por una ecuación DNLS. Al contrario de otros modelos discretos, la DNLS no es una ecuación integrable, siendo ésta la causa de la interesante fenomenología que exhibe no sólo en relación a sus soluciones estacionarias sino también a su dinámica.

Los solitones discretos en arreglos de guías de onda fueron observados por primera vez en 1998 por los grupos de Silberberg y Aitchison [13] utilizando un arreglo de guías de onda altamente no lineales de AlGaAs. Sus resultados fueron claros: al usar láseres de baja potencia, el arreglo se comportó linealmente exhibiendo difracción discreta, mientras que para potencias más altas (del orden de 500 W) la energía se mantuvo confinada en unas pocas guías, indicando la formación de solitones discretos. Desde entonces, muchos experimentos han sido realizados en estos sistemas — en una y dos dimensiones, llevando a una caracterización bastante precisa de los solitones discretos ópticos.

1.2. Condensados de Bose-Einstein dipolares.

En los años setenta se propuso por primera vez la realización de un gas de átomos bosónicos a través de un proceso de congelamiento que utilizara el efecto Doppler [14]. El fenómeno mismo de la condensación bosónica había sido propuesto cincuenta años antes por Satyendra Bose y Albert Einstein. Lo novedoso de este estado de la ma-

teria es la integración de la estadística bosónica con la distribución espacial de un gas diluido, lo que permite tener muchas partículas en un mismo nivel de energía, con una separación promedio entre ellas mucho mayor que las magnitudes relevantes para su interacción. La condensación de Bose-Einstein es uno de los pocos fenómenos cuánticos observables macroscópicamente. Tras muchos experimentos realizados durante la década de los ochenta [15, 16] finalmente se logró la observación experimental de condensados de Bose-Einstein (BEC) con átomos de Rubidio y Sodio [17, 18].

Para el estudio de un BEC, es necesario confinarlo mediante un potencial externo (*trampa*). Generalmente se utilizan potenciales magnéticos u ópticos, o una combinación de los dos. En el caso de una trampa óptica generada por haces de luz láser, es posible formar un patrón de interferencia que produce un potencial periódico sobre el condensado. Cuando es profundo, este potencial da lugar a una fenomenología discreta, mientras que la interacción de contacto entre los bosones implica necesariamente efectos no lineales.

Recientemente, un nuevo tipo de BEC ha estado a disposición de los físicos experimentales, gracias a la formación de condensados con átomos de ^{52}Cr [19]. En este medio, la interacción atómica no es sólo de contacto, sino también de largo alcance, lo que se debe a la gran magnitud del momento dipolar magnético que presenta el ^{52}Cr . Si bien hay moléculas cuyo momento dipolar eléctrico es mucho más fuerte que el momento magnético del Cromo, hasta ahora no ha sido posible construir un BEC con ellas, principalmente debido a la pérdida de átomos durante el proceso de enfriamiento [20, 21].

Varios son los modelos teóricos disponibles para el estudio de un BEC dipolar en una red óptica. Dentro de cierto régimen, la evolución de la función de onda que caracteriza el sistema puede ser descrita por la ecuación de Gross-Pitaevskii (GPE)

generalizada, basada en la teoría de campo medio. Mediante la utilización de las funciones de Wannier como base para expandir la función de onda [16], la GPE puede mapearse en una ecuación DNLS con términos adicionales correspondientes a la interacción dipolar. Los métodos usuales para encontrar soluciones estacionarias y determinar su estabilidad son aplicables a los BECs dipolares, lo que ha permitido encontrar propiedades novedosas, como la existencia de solitones estables isotrópicos y anisotrópicos en dos dimensiones [22]. Las propiedades de estos modos localizados están determinadas por la acción conjunta de la interacción dipolar (no local) y la interacción de contacto (local). Ésta última es inherente a los BECs, por lo que ha sido estudiada en profundidad desde distintos enfoques [15, 16]. No obstante, la posibilidad de contrarrestar su efecto con la interacción dipolar (que puede ser variada en signo y magnitud de forma independiente) permanece aún por explorar. Por ejemplo, las interacciones dipolares pueden hacer que solitones oscuros (*dark solitons*) — inestables en presencia de interacción de contacto repulsiva, sean estables para un BEC en redes ópticas profundas.

A pesar del interés suscitado por los condensados dipolares, la existencia de soluciones localizadas en la superficie, así como la movilidad de solitones en ciertas regiones del espacio de parámetros no ha sido completamente estudiada, por lo cual los BECs dipolares constituyen aún un fértil campo de estudio. En esta tesis, intentaremos hacer una contribución en esa dirección.

1.3. Sistemas desordenados

Si bien la respuesta no lineal es determinante para la obtención de perfiles discretos localizados en sistemas periódicos, no es el único elemento que permite conseguirlos. El desorden presente en un medio lleva a que todos sus modos normales (MNs) sean

localizados espacialmente, fenómeno conocido como *localización de Anderson*, pues éste, en su trabajo de 1958, relacionó por primera vez el problema de la localización con la difusión (o la ausencia de ella) dentro del lenguaje de la mecánica cuántica [23]. Su contribución no se reduce sólo a la formulación del problema, sino que incluye también una estimación cuantitativa de la fuerza del potencial desordenado necesario para cancelar la difusión.

Los primeros esfuerzos por observar el efecto de la localización de Anderson estuvieron dirigidos a comprobar una relación entre desorden y conductividad electrónica, es decir, las propiedades del transporte, principalmente en metales [24]. En esta línea, la reformulación del problema usando teoría de renormalización [25], sentó las bases para la posterior introducción de la *teoría de escalamiento*, uno de los enfoques más exitosos en caracterizar el comportamiento crítico de la conductividad y de la longitud de localización de los autoestados. La idea básica de esta teoría, es que cerca de la transición entre estados extendidos y localizados, basta con una variable de escalamiento para describir el comportamiento de ambos parámetros (conductividad y longitud de localización). Paralelamente, fue necesaria una clasificación previa de los distintos tipos de desorden, que permitiera adecuar la teoría de escalamiento a las propiedades particulares del medio en cuestión. La aparición de nuevas técnicas teóricas y experimentales, permitió que en los ochenta ya se tuviera un cuadro descriptivo bastante completo de los efectos de desorden en la conductividad y la conductancia. Una revisión detallada de estos desarrollos se encuentra en la referencia [26].

A pesar del éxito alcanzado durante sus primeras etapas por la teoría de la localización en sistemas desordenados, la observación explícita de localización de ondas en el interior de un medio (es decir, sin la limitación de conocer sólo el *input* y el *output* del sistema) no fue posible sino hasta algunos años atrás. Dos sistemas físicos

han resultado ser apropiados para el estudio de este fenómeno, a saber, los arreglos de guías de ondas [27–29] y BECs atrapados en redes ópticas [30–32]. Ambos sistemas han permitido la observación de la localización dinámica de paquetes de onda, así como la excitación de modos de Anderson particulares.

En el caso óptico, el desorden es implementado por una perturbación en el índice de refracción inducido en las guías, o bien por un posicionamiento aleatorio de éstas. En principio y bajo ciertas aproximaciones, puede decirse que estos dos mecanismos permiten obtener respectivamente *desorden diagonal* y *desorden no diagonal* por separado. Esta distinción apunta al hecho de que con el primer método la perturbación provocada por el desorden afecta las propiedades locales de cada guía de onda, modificando la diagonal de la matriz en la correspondiente ecuación de autofrecuencias (autoenergías); en cambio, al posicionar aleatoriamente las guías, la alteración se produce en el acoplamiento entre las funciones de onda de cada una, por lo que la modificación formal en la matriz de autoenergías se da fuera de la diagonal. Un ejemplo de la realización experimental de un sistema con desorden diagonal está dado en la ref. [28], donde se usó un arreglo de guías de onda con desorden diagonal para excitar MNs específicos que exhibieran localización de Anderson. El desorden fue introducido a través de una pequeña variación aleatoria en el ancho de cada guía, modificando así su constante de propagación efectiva. Dado que la variación en el ancho es pequeña, puede desprejarse el efecto que tiene en la constante de acoplamiento entre guías, llevando a un sistema con desorden puramente diagonal. Un experimento complementario, en que se cambiara la separación entre las guías manteniendo su ancho constante, permitiría introducir desorden no diagonal solamente.¹

¹En la práctica, es difícil aislar ambos efectos, por lo que, en general, están siempre presentes simultáneamente .

En un BEC, en tanto, el desorden se introduce con una adecuada configuración de los láseres usados para el atrapamiento, que permite remover la periodicidad de la red óptica, a fin de producir un potencial aleatorio. En este caso, la perturbación afecta tanto a las energías en cada sitio de la cadena como a los coeficientes de acoplamiento entre sitios, por lo que no es posible aislar ambos tipos de desorden.

En el último tiempo, muchos estudios se han centrado en el efecto de incluir una respuesta no lineal en sistemas desordenados. En las refs. [33,34] se distinguieron tres regimenes distintos de acuerdo al efecto en la localización de un paquete de ondas propagándose en un sistema no lineal desordenado: cuando la no linealidad es débil, la localización de Anderson prevalece para tiempos largos, pero el pulso finalmente se dispersa; en un regimen intermedio, la dispersión ocurre inmediatamente; para no linealidad fuerte, una parte del paquete de ondas se localiza debido al autoenfoque, mientras que el resto se dispersa subdifusivamente. Así, cierto grado de desorden y no linealidad puede favorecer la dispersión de un pulso. La cuantización de este efecto combinado de desorden y no linealidad es todavía una tarea pendiente.

En este trabajo nos centraremos en dos sistemas realizables mediante un BEC atrapado en una red óptica, en que la localización surge como consecuencia de las interacciones atómicas y del desorden introducido en el sistema, respectivamente.

Capítulo 2

Potenciales periódicos

La descripción de un BEC en una red periódica puede abordarse desde diversos enfoques, no obstante la naturaleza propiamente cuántica del fenómeno de la condensación. Para una visión macroscópica, la introducción de un parámetro de orden simple es posible gracias a la *teoría de campo medio* (TCM), en que la operatoria cuántica es reemplazada por un modelo semiclásico. Incluso dentro de este marco, la interacción atómica aparece como una de las componentes fundamentales en la descripción, dando pie a fenómenos no lineales. La primera parte de este capítulo presenta un resumen del desarrollo necesario para introducir la TCM en el estudio de un condensado.

Sin embargo, antes de discutir la descripción de la fenomenología no lineal a través de la TCM, es provechoso revisar la teoría lineal de una partícula en un potencial periódico. Dado que la dinámica de un BEC es resultado de la combinación de la invariancia traslacional discreta dada por el potencial periódico y de los efectos no lineales aportados por la interacción atómica, la comprensión de las propiedades lineales de un condensado es un requisito imprescindible para el estudio de su dinámica. A lo largo de este capítulo presentamos las consideraciones fundamentales surgidas del sistema lineal, y mostramos como éstas pueden ser incluidas en un modelo discreto.

2.1. Descripción general. Teoría de campo medio.

La condensación de Bose-Einstein es un fenómeno cuántico. Por esta razón, consideramos en primer lugar el hamiltoniano de varios cuerpos que describe N bosones interactuantes sometidos a un potencial externo V_{ext} :

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'). \quad (2.1)$$

Aquí $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ [$\hat{\Psi}(\mathbf{r})$] es el operador de creación [destrucción] de un bosón en la posición \mathbf{r} . El potencial $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ es un potencial interatómico que describe la interacción binaria (de dos cuerpos) entre los átomos que componen el condensado. El hecho de que sólo consideremos interacciones binarias se debe a la definición del BEC como un gas diluído, en que el camino medio entre los átomos es mucho mayor que las longitudes relevantes para la interacción. La aplicación de métodos numéricos al modelo (2.1) permite caracterizar propiedades del sistema, como el estado fundamental y su comportamiento termodinámico [36]. No obstante, los cálculos se dificultan considerablemente al aumentar el número de partículas [15]. Esta es una de las razones¹ que motivan el desarrollo de la *teoría de campo medio* (TCM) para estudiar un BEC en un marco clásico. La idea básica de este enfoque consiste en considerar la parte operatorial de $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ como una perturbación de su valor esperado (promedio cuántico) $\psi = \langle \hat{\Psi} \rangle$. Es decir,²

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) + \hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t), \quad (2.2)$$

donde hemos extendido el planteamiento al caso tiempo dependiente. Asumimos que el operador $\hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t)$, relacionado con las fluctuaciones cuánticas en la distribución de población atómica, es una perturbación. La función $\psi(\mathbf{r}, t)$ es un campo clásico con fase bien definida, y recibe el nombre de *función de onda macroscópica*. Esta nomenclatura es apropiada, en tanto $\psi(\mathbf{r}, t)$ da cuenta de la amplitud de probabilidad de encontrar una partícula en una posición y tiempo determinados, definiendo así la densidad del condensado según $n(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$.

¹Además de la simplificación de los cálculos, la teoría de campo medio permite entender el comportamiento del sistema con un conjunto acotado de parámetros físicos, y describirlo cuantitativamente de forma precisa.

²Para un desarrollo detallado que explique esta aproximación, así como su relación con la matriz densidad que describe el condensado, ver refs. [15, 37] o los fundamentos originales en [38].

A fin de obtener la ecuación para la función de onda ψ , debemos usar primero la ecuación de Heisenberg con el hamiltoniano (2.1).

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} = [\hat{\Psi}, \hat{H}] = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right\} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (2.3)$$

La utilidad de la descomposición (2.2) es clara cuando la perturbación dada por $\hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t)$ es muy pequeña (es decir, cuando el condensado es más bien homogéneo). En ese caso, simplemente reemplazamos el operador $\hat{\Psi}$ por ψ . No obstante, para que esta aproximación sea válida, más consideraciones deben hacerse en relación al término de interacción. Esto es presentado en el capítulo siguiente. Aquí nos referiremos en detalle a las propiedades que surgen del caso no interactuante, en que la evolución temporal de la función de onda macroscópica queda dada sólo por la ecuación siguiente:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.4)$$

Si la dinámica está restringida a una dimensión (las consideraciones necesarias para la realización física de este caso se darán en la sección 3.1), la ecuación correspondiente a (2.4) estará dada por

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{ext}}(x) \right\} \psi(x, t). \quad (2.5)$$

Nos interesa estudiar el caso en que V_{ext} es un potencial óptico (producido por un haz de luz láser) en que el condensado está inmerso. En las secciones siguientes exponemos los elementos necesarios para introducir este potencial en un modelo que posteriormente pueda ser considerado como un sistema discreto.

2.2. Trampas ópticas.

El atrapamiento de átomos con un potencial óptico es posible a través del *efecto Stark*: cuando un átomo es situado en un campo electromagnético oscilante $E(t)$ (como una onda de luz) se induce un momento dipolar dependiente del tiempo

$$D = \alpha(\omega)E(t), \quad (2.6)$$

que provoca una modificación de los niveles de energía atómicos. Aquí α es la polarizabilidad del nivel atómico, que depende de la frecuencia del campo, $\omega = \omega_{\text{res}} + \Delta$, y exhibe una resonancia en ω_{res} . El término Δ queda definido como el *detuning* o diferencia entre la frecuencia del campo y la de resonancia [16].

El cambio ΔE en un nivel de energía del átomo viene dado por

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\alpha(\omega)\langle E^2(t) \rangle, \quad (2.7)$$

donde $\langle \rangle$ se refiere al promedio temporal de E^2 , evaluado sobre un ciclo de oscilación.

Si la frecuencia del campo eléctrico es menor que la de resonancia, α es positivo y el dipolo (2.6) está en fase con el campo. En este caso, el gradiente de la energía potencial resultante apunta en la dirección en que el campo se incrementa. Por lo tanto, una trampa óptica estable puede realizarse enfocando un láser — considerado en lo que sigue como un haz gaussiano — hasta tener una *cintura* de ancho w_0 , con lo que el desplazamiento ΔE (así como la correspondiente energía potencial V) adquiere la siguiente dependencia en la posición:

$$\Delta E(r, z) = V(r, z) = -V_0 \exp(-2r^2/w[z]^2), \quad (2.8)$$

con

$$w[z] = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2}. \quad (2.9)$$

En (2.8) V_0 denota la profundidad de la trampa óptica, que es proporcional al cociente entre el *peak* de intensidad del campo y el *detuning* Δ (el signo negativo se debe a que consideramos el caso $\alpha > 0$, llamado *red detuning*). La variable r corresponde a la posición en la dirección radial.

Expandiendo $V(r, 0)$ (esto es, la energía potencial en la cintura del haz) en torno a $r = 0$ obtenemos

$$V(r, 0) = -V_0 \left(1 - \frac{2r^2}{w_0^2} + \dots \right) \quad (2.10)$$

de donde sigue que, en una aproximación armónica del potencial, la frecuencia de oscilación ω_{\perp} en la dirección radial para un átomo de masa m es dada por

$$\omega_{\perp} = \frac{1}{w_0} \sqrt{2V_0/m}. \quad (2.11)$$

Esta frecuencia cuantifica la fuerza del atrapamiento ejercido por la trampa en la dirección radial; asimismo, es posible definir la frecuencia de oscilación en la dirección longitudinal. No obstante, como la distancia característica en la dirección z es la *longitud de Rayleigh* z_R , el atrapamiento longitudinal es mucho más débil que el radial. Por esta razón, si se quiere confinar fuertemente a los átomos en todas direcciones es necesario usar varios láseres orientados perpendicularmente, o bien utilizar otro método de atrapamiento en combinación con la trampa óptica (por ejemplo, confinamiento magnético).

2.3. Potencial periódico. Redes ópticas.

Cuando dos láseres propagándose en sentido contrario se superponen, el patrón de interferencia que se forma da origen a un potencial periódico. En efecto, consideremos dos láseres idénticos (es decir, de igual intensidad, polarización y longitud de onda) que se propagan en la dirección x con vectores de onda respectivos $\mathbf{k}_1 = k \hat{\mathbf{x}}$ y

$\mathbf{k}_1 = -k \hat{\mathbf{x}}$, donde $k = 2\pi/\lambda$ y λ es la longitud de onda común a los dos láseres. En ese caso,

$$\langle |E|^2 \rangle = E_0^2 |e^{ikx} + e^{-ikx}|^2 \propto E_0^2 \cos^2(kx). \quad (2.12)$$

Luego, la energía potencial originada por el campo óptico, a través del efecto Stark, resulta ser

$$V(x) = V_0 \cos^2(\pi x/d), \quad (2.13)$$

donde $d = \lambda/2$ es el espaciamiento de la red y V_0 es su profundidad, proporcional al cuadrado de la amplitud del campo óptico. V_0 suele medirse en unidades de la *energía de retroceso (recoil energy)* dada por

$$E_r = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2}, \quad (2.14)$$

que corresponde a la energía entregada a un átomo que interactúa con un fotón de los que componen el campo óptico, a través de la transmisión de momento lineal. Por tanto, la profundidad del potencial se define con el parámetro adimensional

$$s = V_0/E_r. \quad (2.15)$$

Notemos que el ensanchamiento de los haces gaussianos lleva a una pérdida de la periodicidad lejos del ancho mínimo (foco). No obstante, como el espaciamiento d

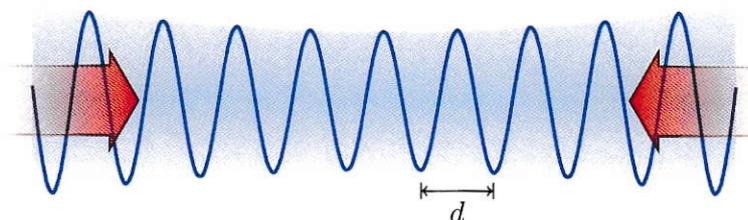


Figura 2.1: Dos láseres propagándose en contra forman una red óptica unidimensional. El patrón de interferencia da origen a un potencial óptico que, en cierta región, puede considerarse periódico con periodo d .

de la red es proporcional a la longitud de onda del láser y mucho menor que z_R , el potencial puede ser considerado periódico y descrito por (2.13) en una región extendida sobre varios cientos de pozos de potencial (sitios de la red) [39].

Con un procedimiento análogo al utilizado para calcular la frecuencia de atrapamiento radial en la sección anterior, es posible expandir el potencial en torno a alguno de sus mínimos y encontrar la frecuencia de oscilación armónica de un átomo atrapado en uno de los pozos de la red:

$$\omega_{\text{red}} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{2V_0}{m}}. \quad (2.16)$$

Al comparar esta expresión con ω_{\perp} (2.11), nos permite ver que ambas frecuencias son inversamente proporcionales a sus longitudes características correspondientes (la cintura del haz w_0 y la longitud de la red d , respectivamente). Para un haz con cintura $w_0 = 10 \mu\text{m}$ pueden alcanzarse frecuencias radiales de unos cuantos Hz; por otro lado, la longitud d de una red óptica generada por un láser de $\lambda = 800 \text{ nm}$ es aproximadamente veinte veces mayor. Luego, con una misma intensidad de láser puede construirse un potencial óptico que localmente tiene una frecuencia de atrapamiento armónico de varios kHz.

2.4. Autoestados de un BEC con potencial periódico. Sistema lineal.

Antes de considerar las interacciones atómicas presentes en un BEC³ — es decir, considerando sólo la parte lineal del sistema — podemos deducir algunas propiedades de los autoestados y las autoenergías que lo describen, únicamente a partir de la periodicidad del potencial [en lo que sigue nos limitamos al caso unidimensional

³Estas serán integradas al modelo en el capítulo siguiente.

descrito por (2.5)]:

$$V_{\text{ext}}(x) = V_0 \cos^2(kx) = sE_r \cos^2(kx). \quad (2.17)$$

La teoría que rige la forma del espectro lineal y los correspondientes autoestados es una extrapolación directa de los resultados básicos en la teoría de sólidos [40]. La conexión entre sólidos y átomos insertos en una onda de luz estacionaria ha sido discutida en [41]. Esta correspondencia permite que las soluciones estacionarias del sistema sean encontradas a partir de la aplicación del teorema de Bloch, según el cual las autofunciones de onda de un hamiltoniano con un potencial periódico son de la forma

$$\phi_{n,q} = e^{iqx} u_{n,q}(x). \quad (2.18)$$

Aquí, q es el llamado *cuasi momento*, n indica el índice de la banda (esto será explicado más adelante), y la función $u_{n,q}(x)$ tiene la misma periodicidad espacial del potencial $V(x)$, es decir, $u_{n,q}(x+d) = u_{n,q}(x)$. Esta última propiedad permite describir las funciones $\phi_{n,q}$ y el potencial $V(x)$ como una serie de Fourier, con el *vector de red recíproca* definido por $G = 2\pi/d$:

$$\phi_{n,q} = e^{iqx} \sum_m c_m^n e^{imGx}, \quad (2.19)$$

$$V(x) = \sum_m V_m e^{imGx} \quad (2.20)$$

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación de Schroedinger lineal (2.5) y truncando las sumas en algún $m = \mathcal{M}$, obtenemos un conjunto de $2(2\mathcal{M} + 1)$ ecuaciones algebraicas:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (q - mG)^2 + V_0 \right\} c_{q-mG} + \frac{V_0}{4} c_{q-(m+1)G} + \frac{V_0}{4} c_{q-(m-1)G} = E c_{q-mG}. \quad (2.21)$$

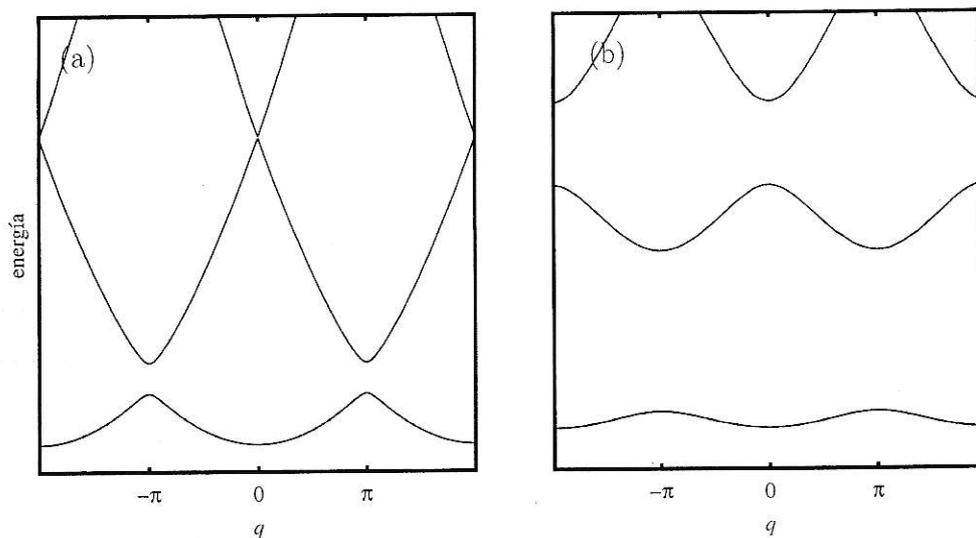


Figura 2.2: Bandas de energía de un sistema periódico. (a) Potencial débil ($\sim E_r$): las bandas son más anchas que los gaps; éstos se estrechan cada vez más para bandas superiores. (b) Potencial profundo ($\sim 10E_r$): La primera banda está separada de la segunda por un gap mucho más ancho que ellas.

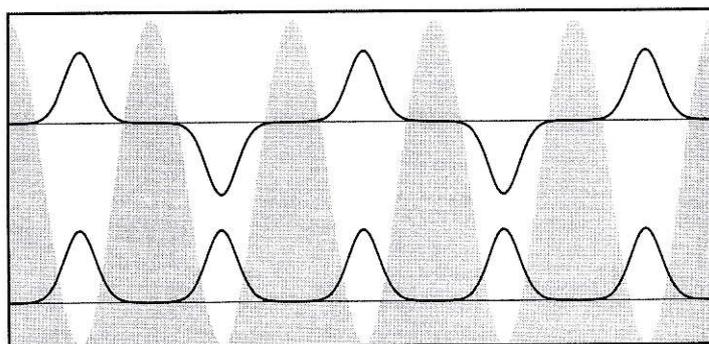


Figura 2.3: Funciones de Bloch para un potencial óptico de profundidad $\sim 4E_r$, correspondientes a cuasimomento $q = 0$ (abajo) y $q = \pi$ (arriba).

El índice m toma los valores $-\mathcal{M}, -\mathcal{M} + 1, \dots, \mathcal{M} - 1, \mathcal{M}$. Luego, para cada cuasimomento q , esta ecuación permite encontrar $2\mathcal{M} + 1$ autoenergías diferentes E_n , cada una perteneciente a una *banda de energía* rotulada con n . Así, las autoenergías y los autoestados dependen de la profundidad del potencial y del cuasimomento q . La figura 2.2 muestra las primeras bandas para dos potenciales distintos; la figura 2.3 las autofunciones correspondientes a los bordes inferior y superior de la primera banda para un potencial intermedio. Es importante destacar que en el límite $V_0 \rightarrow 0$, el sistema corresponde a un medio continuo, sin bandas de energía.

2.5. Límite de potencial profundo. Funciones de Wannier.

Cuando la profundidad del potencial óptico es grande, la separación entre las bandas es también grande y, en concordancia, la variación de la energía con el cuasimomento q es pequeña.

Dado que las partículas en un condensado están en el estado de mínima energía, nos concentraremos específicamente en la primera banda. La ref. [42] presenta una ex-

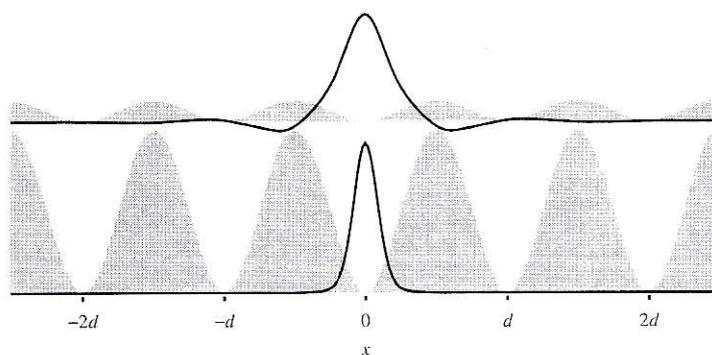


Figura 2.4: Funciones de Wannier de orden cero para un potencial débil ($\sim 0.5E_r$, arriba) y uno fuerte ($\sim 8E_r$, abajo).

presión analítica para la dependencia de la energía en el cuasimomento en la primera banda, conviene a saber,

$$\frac{E(q)}{E_r} = \sqrt{s} - 2\kappa \cos(qd), \quad (2.22)$$

con

$$\kappa = \frac{4}{\sqrt{\pi}}(s)^{3/4} e^{-2\sqrt{s}}. \quad (2.23)$$

Con respecto a las autofunciones, podemos ver que los estados de Bloch en $q = 0$ y en $q = \pi/d$, difieren en la fase relativa de la función de onda entre dos mínimos adyacentes del potencial (para $q = 0$ la función es no escalonada o *unstaggered*, mientras que para π/d es escalonada o *staggered*), pero comparten una característica importante, a saber, ser combinación de funciones localizadas en cada sitio de la red óptica (ver fig. 2.3). Luego, para estudiar la dinámica en este límite, resulta útil la introducción de las *funciones de Wannier*, definidas como la transformada de Fourier de las funciones de Bloch, según:

$$\Phi_n(R, x) = \frac{1}{d} \int dq e^{-iRq} \phi_{n,q}(x), \quad (2.24)$$

donde R indica el centro de la función de Wannier. Según esta definición general, las funciones de Wannier pueden ser complejas. No obstante, en su trabajo de 1959, Kohn mostró que por cada banda existe una función de Wannier que es real, simétrica y exponencialmente localizada [43]. Esta última propiedad es necesaria para nuestra descripción, por lo cual consideraremos solamente las funciones de Wannier reales. Además, dado que nuestro estudio involucra estados de mínima energía, nos limitaremos a las funciones de orden cero, y adoptaremos la notación

$$\Phi_j(x) = \Phi_0(R = jd, x),$$

donde j indica el sitio de la red en que está centrada la función de Wannier ($x = 0$ para el primer sitio). La figura 2.4 muestra la función de Wannier de orden cero y el potencial periódico correspondiente.

Si bien no hemos considerado aún la interacción atómica del sistema, es necesario señalar que la extensión del modelo de potencial profundo al caso no lineal implica una modificación de las funciones de Wannier, debido al cambio en la densidad local del BEC, que a su vez depende del número de átomos $N_j(t)$ en el mínimo j -ésimo del potencial [44]. De modo que la definición de $\Phi_j(x)$ debe ser generalizada como sigue.

$$\Phi_j(x) \longrightarrow \Phi_j(x, N_j(t)). \quad (2.25)$$

Esta modificación se condice con la consideración de la componente transversal de la función de onda, que se ve afectada cuando la densidad atómica es muy grande. No obstante, en nuestro análisis es posible omitir la dependencia de $\Phi_j(x)$ en $N_j(t)$, lo que puede considerarse como el caso de orden cero en la expresión (2.25).⁴ Luego, la función de onda macroscópica para un condensado de Bose-Einstein en un potencial óptico profundo puede descomponerse como

$$\psi(x, t) = \sum_m^M u_m(t) \Phi_m(x), \quad (2.26)$$

donde $u_m(t) \in \mathbb{C}$ y el índice m corre sobre los M sitios de la red.

⁴En la realización experimental de condensados con interacciones dipolares, las densidades atómicas obtenidas son bajas [21], permitiendo que esta aproximación sea válida. En el caso general, el rango de validez queda definido por las frecuencias de atrapamiento que caracterizan el potencial óptico [44].

2.6. Discretización del modelo. Ecuación discreta lineal de Schroedinger.

De acuerdo a lo visto en las secciones anteriores, en el límite de potencial profundo la dinámica lineal del BEC queda bien descrita a través del efecto túnel de funciones localizadas entre pozos de potencial vecinos. La constante de *tunelaje* o acoplamiento (también llamada *taza de hopping*) viene dada por

$$\kappa \simeq - \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Phi_m \cdot \nabla \Phi_{m+1} + \Phi_m V_{\text{ext}} \Phi_{m+1} \right], \quad (2.27)$$

esto es, el hamiltoniano lineal promediado sobre las funciones de Wannier en dos sitios vecinos (aquí hemos vuelto al caso general en cualquier dimensión). De forma análoga, definimos la *energía en sitio* — a veces llamada constante de autoacoplamiento — como la integral del hamiltoniano pesada con la función de Wannier en un solo sitio según

$$\bar{\epsilon}_m \simeq - \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \Phi_m)^2 + V_{\text{ext}} \Phi_m^2 \right]. \quad (2.28)$$

Estas integrales aparecen naturalmente al reemplazar ψ con el ansatz (2.26) en la ecuación de Schroedinger (2.4), multiplicar por $\Phi_m(\mathbf{r})$ e integrar espacialmente [44]. Este procedimiento lleva a la siguiente ecuación de Schroedinger discreta para la evolución de la amplitud $u_m(t)$ de la función de onda en el sitio m -ésimo:

$$i\hbar \frac{\partial u_m(t)}{\partial t} = \kappa [u_{m-1}(t) + u_{m+1}(t)] + \bar{\epsilon}_m u_m(t), \quad (2.29)$$

donde se ha usado la ortonormalidad de las funciones de Wannier:

$$\int d\mathbf{r} \Phi_n \Phi_{n+1} = 0, \quad \int d\mathbf{r} \Phi_n^2 = 1. \quad (2.30)$$

Esta propiedad se mantiene incluso cuando el potencial óptico es ligeramente aperiódico. En ese caso, las funciones de Wannier son distintas para cada sitio de la red y

asimismo los coeficientes de energía de sitio y acoplamiento varían, siendo necesario rotularlos con un índice ϵ_ℓ y κ_ℓ . Esto se usará en el capítulo 5 para estudiar sistemas desordenados.

En ocasiones, para efectos de cálculo, es conveniente normalizar la energía de sitio y rescalar el tiempo según

$$\epsilon = \frac{\bar{\epsilon}}{2\kappa}, \quad t \longrightarrow \frac{\hbar}{2\kappa}t, \quad (2.31)$$

con lo que la ec. (2.29) queda

$$i\frac{\partial u_m(t)}{\partial t} = u_{m-1}(t) + u_{m+1}(t) + \epsilon_m u_m(t). \quad (2.32)$$

Esta ecuación puede obtenerse como una ecuación de movimiento canónica,

$$\dot{u}_m = \frac{\partial H}{\partial(iu_m^*)}, \quad (2.33)$$

con el hamiltoniano lineal discreto

$$H = \sum_n \left\{ -\frac{1}{2}(u_n u_{n+1}^* + u_n^* u_{n+1}) + \epsilon_n |u_n|^2 \right\}. \quad (2.34)$$

Tanto las propiedades lineales de un BEC como la discretitud del sistema en presencia de un potencial profundo, están presentes en el modelo cuya deducción hemos expuesto en este capítulo. No obstante, la descripción no está completa, en tanto hemos omitido las interacciones entre las partículas que componen el condensado, cuestión que se desarrollará en el capítulo siguiente.

Capítulo 3

Interacciones atómicas

En este capítulo presentamos una descripción de dos tipos de interacción atómica existentes en los condensados de Bose-Einstein, que dan lugar a una interesante y diversa dinámica.

En primer lugar, resumimos la descripción general de las interacciones atómicas locales en base a la teoría de campo medio, ampliamente utilizada en la mayoría de estudios semiclásicos de BECs. Bajo ciertos parámetros, es posible describir el sistema con un modelo discreto, que será utilizado en nuestro estudio numérico en los siguientes capítulos. En segundo lugar, introducimos la interacción atómica de largo alcance presente en BECs cuyos átomos exhiben un momento magnético permanente considerable, como es el caso del Cromo⁵², cuya condensación fue realizada exitosamente en años recientes [19]. Dos acercamientos distintos son mostrados, para identificar la modificación en nuestro modelo discreto debida a la inclusión de la interacción dipolar.

3.1. Interacción de contacto. Ecuación de Gross-Pitaevskii

En el capítulo anterior se planteó que, en general, la evolución temporal de un condensado estaba regida por la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} = [\hat{\Psi}, \hat{H}] = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right\} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (3.1)$$

La interacción de contacto, asociada a las colisiones entre las partículas que componen el BEC, está representada por el término que contiene al potencial $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Este término puede simplificarse si consideramos que el gas está suficientemente diluido, de modo que sólo se dan colisiones binarias (entre dos bosones). Además, el hecho de que en un BEC los átomos están en el estado de mínima energía implica

que en una expansión multipolar del potencial de interacción, sólo la aproximación a primer orden (con simetría esférica) es necesaria para una descripción correcta. Por esta razón, es posible caracterizar la interacción a través de un único parámetro, la *longitud de scattering* a_s . En una analogía con la descripción clásica de colisiones, puede identificarse a_s con el radio de un blanco esférico interactuando con un proyectil a energía tan baja que cualquier estructura interna del blanco puede ser ignorada. Como se dijo, es necesario que el gas esté bien diluido, a fin de que el camino libre medio entre bosones sea mucho mayor que la longitud de *scattering*. Los argumentos anteriores llevan a la definición del siguiente *seudopotencial* para colisiones binarias:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \gamma\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.2)$$

donde la constante γ se relaciona con a_s según

$$\gamma = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}. \quad (3.3)$$

Ahora reemplazamos el operador $\hat{\Psi}$ con la función de onda macroscópica ψ para obtener

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \gamma|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.4)$$

Esta es la *ecuación de Gross-Pitaevskii* (GP), derivada por Gross (1961 y 1963) y Pitaevskii (1961), válida para las aproximaciones expuestas anteriormente, y cuando el número de átomos es mucho mayor que uno. En particular, es necesario enfatizar que el reemplazo del operador $\hat{\Psi}$ en favor de su valor esperado — central en la teoría de campo medio — es válido sólo a muy baja temperatura, en que todas las partículas están en el estado fundamental. Bajo ese régimen, la ecuación de GP describe la evolución macroscópica del sistema, caracterizada por el parámetro de orden $\psi(\mathbf{r}, t)$.

La ecuación (3.4) se simplifica cuando nos referimos a una red unidimensional posicionada a lo largo de una dirección x . Este caso corresponde a un confinamiento con una trampa con simetría cilíndrica ¹ en que la frecuencia de atrapamiento radial ω_{\perp} es mucho mayor que la frecuencia en la dirección axial. A fin de mantener los átomos en su estado fundamental, es necesario que la energía originada por la interacción atómica sea menor a la separación entre los estados vibracionales transversales $\Delta E_{\perp} = \hbar\omega_{\perp}$. Dentro de esta aproximación, la parte radial $\phi_{\perp}(y, z)$ de la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t) = \phi_{\perp}(\rho, t)\psi_x(x, t)$, con $\rho = y^2 + z^2$, puede considerarse como una gaussiana cuyo ancho corresponde al estado fundamental transversal. Luego, la ecuación resultante para $\psi_x(x, t)$ es [45]

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_x(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{ext}}(x) + \gamma_{1D}|\psi_x(x, t)|^2 \right] \psi_x(x, t), \quad (3.5)$$

donde

$$\gamma_{1D} = 2a_s\hbar\omega_{\perp}. \quad (3.6)$$

Notese que la condición planteada con respecto a la energía de interacción y su cota $\hbar\omega_{\perp}$, se traduce en un valor máximo posible para la densidad $n_{1D} = |\psi_x(x, t)|^2$ en el término no lineal de (3.5):

$$n_{1D} < 1/2a_s, \quad (3.7)$$

lo que se cumple en la mayoría de los experimentos actuales.²

Cuando la profundidad V_0 de la red óptica es grande, nos encontramos en el límite de potencial profundo (ver secs. 2.5 y 2.6) y podemos discretizar la ecuación de GP general (3.4) expandiendo la función de onda ψ en las funciones de Wannier $\Phi_n(\mathbf{r})$

¹Al menos en cierto rango, ver sección 2.3.

²En el caso del Rubidio, esto implica una densidad lineal máxima de 100 átomos/ μm [16].

(o $\Phi_n(x)$ para el caso 1D) centradas en los mínimos del potencial,

$$\psi = \sum_n u_n(t) \Phi_n(\mathbf{r}), \quad (3.8)$$

Luego, sustituyendo en (3.4), multiplicando por $\Phi_n(\mathbf{r})$ e integrando en todo el espacio, obtenemos que la interacción de contacto es incluida en el modelo discreto (2.29) a través de un término no lineal cúbico:³

$$i\hbar \frac{\partial u_n(t)}{\partial t} = \epsilon_n u_n(t) + \kappa [u_{n-1}(t) + u_{n+1}(t)] + q |u_n(t)|^2 u_n(t), \quad (3.9)$$

con q definido como

$$q = \gamma N_t \int d\mathbf{r} |\Phi_n|^4(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

o en el caso unidimensional:

$$q = \gamma_{1D} N_t \int dx |\Phi_n|^4(x), \quad (3.11)$$

donde N_t corresponde al número total de átomos.

La ecuación (3.9) es la forma estándar de la *ecuación de Schroedinger no lineal discreta* (DNLS), ampliamente utilizada para describir la dinámica de un BEC atrapado en una red óptica profunda, así como otros sistemas físicos [7]. Sus propiedades serán tratadas con mayor detalle en 3.5.

3.2. Manipulación de la interacción de contacto. Resonancias de Feshbach

Tanto en el caso general como en el unidimensional, la constante γ con que se define el seudopotencial de la interacción de contacto es proporcional a la longitud de *scattering* a_s [ecs. (3.3) y (3.6)]. Luego, un cambio en este parámetro implica un

³Aquí usamos ϵ_n para denotar la energía de sitio en vez del $\bar{\epsilon}_n$ usado en la sección 2.6.

cambio en la energía de interacción. La manipulación de a_s es posible a través del mecanismo conocido como *resonancias de Feshbach*, en que la longitud de *scattering* es variada mediante un campo magnético espacialmente homogéneo de magnitud B .

La fenomenología básica detrás del proceso que lleva a las resonancias de Feshbach se resume como sigue⁴. La interacción entre dos átomos que colisionan a una cierta energía E da origen a potenciales moleculares que dependen de la distancia interatómica r y cuya relación con la energía de interacción variará según la configuración total de los grados de libertad atómicos (como en el caso de la adición de momento angular intrínseco o *spin* de los átomos). Cuando la energía asintótica (para $r \rightarrow \infty$) del potencial es menor que E (ver figura 3.1), decimos que aquél es un *canal abierto* o *canal de entrada*; si contrariamente el potencial asintótico supera la energía de la colisión, se trata de un *canal cerrado*, con sus correspondientes estados ligados. Por simplicidad consideremos sólo dos canales, uno cerrado y uno abierto (en experimentos con bosones es adecuado suponer la existencia de un solo canal abierto, toda vez que puede desecharse la probabilidad de transición de los átomos a niveles de energía más altos [20]). Evidentemente, dos átomos lejanos que se acercan para colisionar constituyen un estado de *scattering* (cuya energía es E) del canal abierto y en ausencia de acoplamiento se mantendrían en este canal. Sin embargo, si un estado ligado del canal cerrado tiene energía cercana a E puede ocurrir acoplamiento resonante entre los canales: los átomos sufren una transición virtual al estado ligado, constituyendo una *seudomolécula* cuya duración es inversamente proporcional a la diferencia entre la energía del estado ligado E_b y la energía del estado de *scattering* E . Incluso si el acoplamiento es débil, la mezcla entre canales es

⁴Una revisión completa de este fenómeno (incluyendo su aplicación experimental en diversos sistemas moleculares) se encuentra en el reporte [46]. Para una explicación cualitativa que cubra también los desarrollos analíticos que describen las resonancias de Feshbach, pueden consultarse las referencias [20, 47]

fuerte [46] lo que modifica notablemente las propiedades del *scattering* atómico. La proximidad entre los niveles de energía del estado de entrada y el ligado es un requisito indispensable para el acoplamiento; si no se da, es posible aprovechar la diferencia en los momentos magnéticos de los canales abierto y cerrado, $\Delta\mu = \mu_{\text{cerrado}} - \mu_{\text{abierto}}$ para modificar la energía relativa entre aquellos a fin de acercar el estado ligado a la energía E , produciéndose así acoplamiento resonante, es decir, una resonancia de Feshbach magnética ⁵. Si $E_b - E$ es reducido a valores muy pequeños, la duración de la molécula virtual puede incrementarse a tiempos mucho mayores que los requeridos por el proceso de colisión, incrementando la amplitud de *scattering* [47]. Así, cerca de una resonancia, la longitud de *scattering* varía según

$$a_s(B) = a_0 \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_r} \right). \quad (3.12)$$

El significado de todos los parámetros en esta expresión, se muestra en la figura 3.2: B_r es la posición de la resonancia, ΔB es su ancho y a_0 es la longitud de *scattering* en ausencia de estados ligados resonantes (relacionada con el potencial del canal cerrado). En B_r la longitud de *scattering* diverge. Es importante notar que la longitud de *scattering* toma valores positivos y negativos, y se anula para un campo magnético $B = B_r + \Delta B$. Luego, la aplicación de un campo magnético permitiría en principio cambiar el sentido de las interacciones atómicas en la proximidad de una resonancia de Feshbach, e incluso cancelar completamente la interacción para formar un gas ideal. Esta posibilidad es fundamental para la elección del rango de parámetros en nuestro análisis de BECs dipolares, donde dos tipos de interacción compiten.

⁵El acoplamiento resonante también puede conseguirse con métodos ópticos [48, 49].

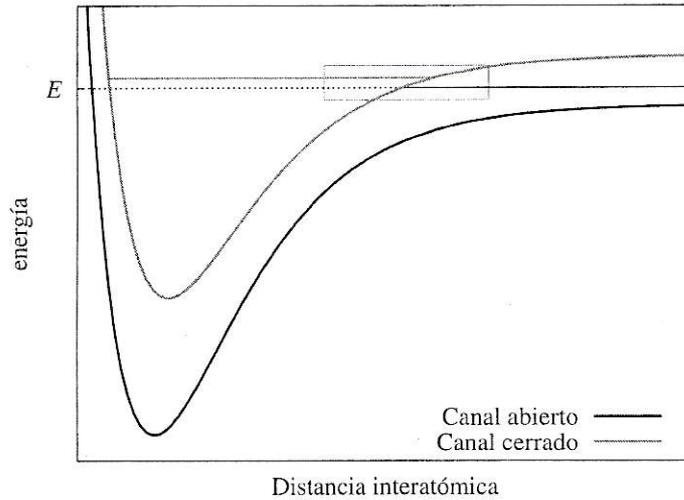


Figura 3.1: Modelo básico de dos canales para una resonancia de Feshbach. Los dos átomos en colisión corresponden a un estado E del espectro continuo del canal abierto (línea negra). El canal cerrado tiene al menos un estado ligado E_b (línea gris). Cuando E y E_b están cerca puede producirse acoplamiento (rectángulo).

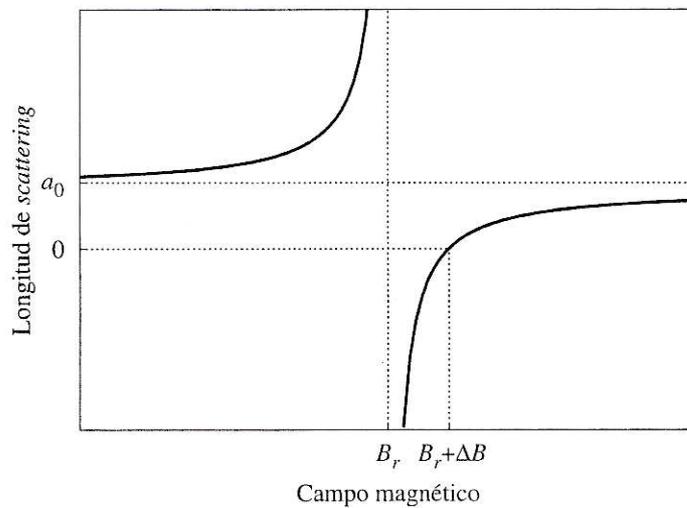


Figura 3.2: Variación de la longitud de scattering a_s cerca de una resonancia de Feshbach. B_r es el valor del campo magnético externo para el cual a_s diverge. Con un campo $B_r + \Delta B$ la longitud de scattering se anula.

3.3. Interacción dipolar.

En condensados cuyos átomos presentan un momento dipolar magnético considerable, no basta con estudiar la interacción de contacto descrita previamente; la interacción entre los dipolos también ha de tenerse en cuenta.

Consideremos dos partículas con momento dipolar magnético dirigido a lo largo de los vectores \mathbf{e}_1 y \mathbf{e}_2 , respectivamente, cuya posición relativa es \mathbf{r} [fig. 3.3 (a)]. La energía correspondiente a la interacción entre los dos dipolos estará dada por [21]

$$U_{\text{dd}}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \left[\frac{(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) r^2 - 3(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^5} \right], \quad (3.13)$$

donde μ corresponde al momento magnético permanente de las partículas y μ_0 es la permeabilidad del vacío (en adelante definimos $C_{\text{dd}} = \mu_0 \mu^2$). Cuando el medio está polarizado magnéticamente (por ejemplo por la acción de un campo magnético externo), todos los dipolos apuntan en una misma dirección, por lo que la energía de interacción U_{dd} puede expresarse de forma más simple:

$$U_{\text{dd}}(\mathbf{r}) = \frac{C_{\text{dd}}}{4\pi} \left[\frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3} \right], \quad (3.14)$$

donde θ denota el ángulo entre la dirección de magnetización y la posición relativa entre las partículas, como se muestra en la fig. 3.3 (b).

Dos propiedades importantes de la interacción dipolo-dipolo se muestran en la ec. (3.14), a saber, el largo alcance (del orden de $1/r^3$) en la energía de interacción, y su carácter anisotrópico, dado por el factor $\cos^2 \theta$. La interacción dipolar tiene la simetría angular de un polinomio de Legendre de segundo orden $P_2(\cos \theta)$. Cuando θ varía entre 0 y $\pi/2$, el factor $1 - 3 \cos^2 \theta$ toma valores entre -2 y 1 . Esto último implica que la magnitud, e incluso el efecto, de la interacción dipolar puede variar de acuerdo a la orientación de los dipolos entre sí: es repulsiva para dipolos alineados lado a lado,

y es atractiva para dipolos puestos en fila, teniendo en el segundo caso el doble de fuerza que en el primero (fig. 3.4). Cuando θ toma el valor $\theta_m = \arccos(1/\sqrt{3}) \simeq 54.7^\circ$ (llamado *ángulo mágico* en resonancia magnética nuclear [50,51]), la interacción dipolar se anula. A pesar de esta dependencia de la interacción con respecto a la posición relativa entre los dipolos, es posible ajustar globalmente su magnitud e incluso su sentido a través de un campo magnético externo. Los detalles de este procedimiento se explican en la referencia [21]. Aquí simplemente absorbemos ese factor variable en el coeficiente C_{dd} .

Al incluir el término de interacción dipolar en la ecuación GP unidimensional (3.5) obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_x(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{ext}}(x) + \gamma_{1D} |\psi_x(x, t)|^2 + \frac{C_{dd}}{4\pi} \int (1 + \cos \theta) \frac{|\psi(x')|^2}{|x - x'|^3} dx' \right] \psi_x(x, t), \quad (3.15)$$

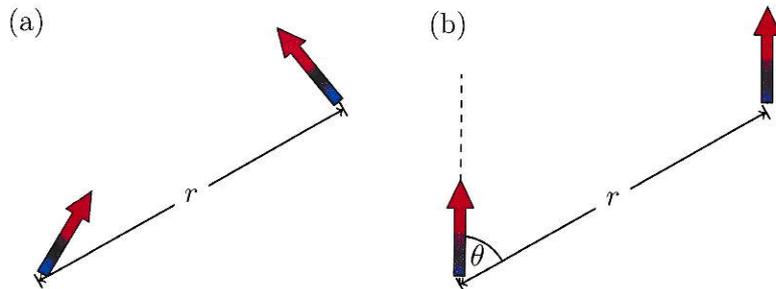


Figura 3.3: Dipolos interactuantes (a) con cualquier orientación (sin polarización) y (b) orientados en la dirección del campo magnético externo, θ es el ángulo con respecto a la longitud de separación.

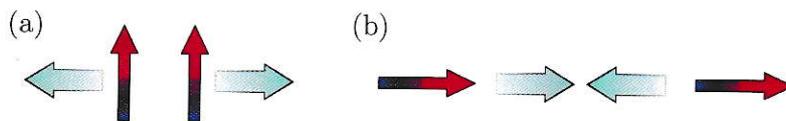


Figura 3.4: (a) Cuando los dipolos están orientados lado a lado ($\theta = \pi/2$), la fuerza de interacción es repulsiva. (b) Cuando están en fila ($\theta = 0$), la interacción es atractiva.

A partir de la ecuación (3.15), podemos incorporar la interacción dipolar a nuestro modelo discreto (3.9) expandiendo la función de onda en las funciones de Wannier $\Phi_n(x)$ centradas en los mínimos del potencial, es decir $\psi(x, t) = \sum_n u_n(t)\Phi_n(x)$. Al reemplazar en (3.15), surgen integrales de traslape representando el acoplamiento dipolar entre dos sitios n y m de la red:

$$g_{nm} = \frac{C_{dd}}{4\pi} \int dx dx' \Phi_n(x)\Phi_m(x') \left[\frac{1 + \cos\theta}{|x - x'|^3} \right] \Phi_n(x)\Phi_m(x') \quad (3.16)$$

Luego, vemos que la interacción dipolar también contribuye a la no linealidad en sitio a través del coeficiente g_{nn} , junto a la interacción de contacto. Por lo tanto, si se busca suprimir la interacción local en favor de la no local, no basta con aplicar las resonancias de Feshbach para anular la longitud de *scattering*: la contribución de la interacción dipolar sigue presente. Sin embargo, puede probarse que g_{nn} depende fuertemente de la anisotropía de la función de onda en el fondo de los pozos de potencial [52]. Por ejemplo, cuando los dipolos están orientados verticalmente, la interacción dipolar en sitio es atractiva o repulsiva para pozos cilíndricos, mientras que para pozos esféricos se anula. Luego, el parámetro g_{nn} puede ajustarse manipulando la anisotropía de las funciones de Wannier, esto es, modificando la red óptica con una configuración apropiada de los láseres que la forman. Por simplificación, en lo que sigue descartamos la contribución local g_{nn} y retenemos solamente $g_{n,n+1} = g$, el coeficiente de acoplamiento no lineal a primeros vecinos, de donde se sigue que

$$-i\frac{d}{dt}u_n(t) = \kappa(u_{n+1} + u_{n-1}) + q|u_n|^2u_n + g(|u_{n+1}|^2 + |u_{n-1}|^2)u_n \quad (3.17)$$

es la ecuación que describe la dinámica de la amplitud $u_n(t)$ de la función de onda.

3.4. Interacciones no locales. Planteamiento general.

Para concluir la definición del modelo utilizado en nuestro estudio, presentamos un planteamiento alternativo de las interacciones de largo alcance, obtenido al introducir funciones de respuesta o *kernels* en la ecuación de Gross-Pitaevski. Este método es usado frecuentemente para cuantificar la no localidad de distintas clases de efectos no lineales en función de un sólo parámetro [53–56] y consiste en una expresión más general del término de interacción en la ecuación GP:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial T} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} - V_0 \cos(2kX)\psi + \gamma_{1D} |\psi|^2 \psi + \frac{2\alpha d^2}{l_{\perp}^3} \psi(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi R(|X - \xi|) |\psi(\xi, t)|^2 = 0. \quad (3.18)$$

Como antes, $\gamma_{1D} = 2\hbar a_s \omega_{\perp}$ es la constante que define el potencial equivalente para la interacción de contacto. Dado que es posible cancelar a_s utilizando las resonancias de Feshbach (sec. 3.2) en lo que sigue omitiremos este término, siguiendo el planteamiento presentado en [56]. El coeficiente d denota la magnitud del momento dipolar. El parámetro α puede variar entre 1 y $-1/2$ según la orientación de los dipolos sea más o menos paralela o perpendicular al eje x . La función de respuesta o kernel $R(x)$ está presente en el término de interacción e introduce formalmente la no localidad de ésta. Originalmente, el uso de kernels surgió en el ámbito de la óptica no lineal, donde el cambio en el índice de refracción se relaciona con la intensidad I del haz de luz incidente mediante el siguiente producto de convolución [53]:

$$\Delta n(I) = \pm \int_{-\infty}^{\infty} R(x' - x) I(x', z) dx'. \quad (3.19)$$

De forma análoga, para el estudio de condensados, todas las interacciones son reunidas en la convolución de $R(x)$ con la densidad $|\Psi(\xi, t)|^2$. Tres kernels usados

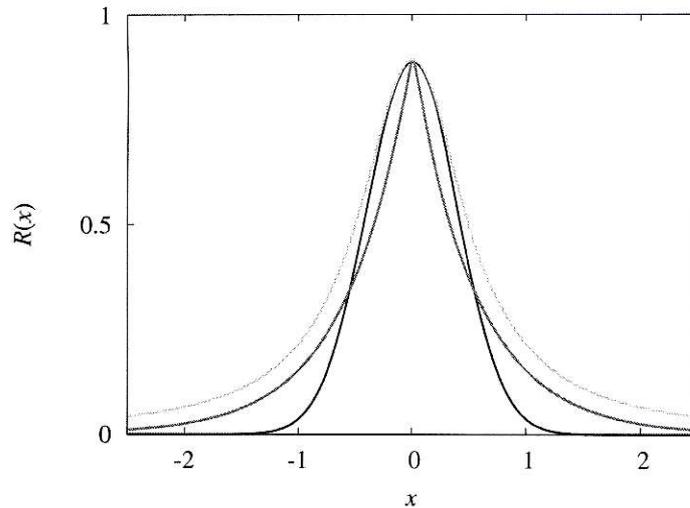


Figura 3.5: Funciones de respuesta normalizadas. La curva negra corresponde a $R_1(x)$, la gris oscuro a $R_2(x)$ y la gris claro a $R_3(x)$. El ancho tomado es $\sigma = \pi^{-1/2} \sim 0.56$.

frecuentemente son: el gaussiano,

$$R_1(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right), \quad (3.20a)$$

el exponencial,

$$R_2(x) = \frac{1}{2\sigma} \exp\left(-\frac{|x|}{\sigma}\right), \quad (3.20b)$$

y el *lorentziano generalizado*,

$$R_3(x) = \frac{10}{\pi} \sigma^3 (x^2 + \sigma^2)^{-3/2}. \quad (3.20c)$$

Podemos ver que los tres satisfacen la normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(x) dx = 1. \quad (3.21)$$

En las expresiones (3.20), el ancho σ determina el grado de no localidad de las interacciones no lineales. La figura 3.5 muestra la forma de las tres funciones de

respuesta para distintos valores de σ . Los dos primeros kernels, o variaciones de estos, son apropiados para describir un BEC en una trampa cuasi unidimensional, y toman asintóticamente la forma de una función delta cuando $\sigma \rightarrow 0$, con lo que formalmente el modelo deviene en la ecuación de Gross-Pitaevskii estándar de la sección 3.1. El tercer kernel (3.20c), en tanto, es más conveniente para un estudio analítico, caso en el que σ es tomado como parámetro de corte [57] proporcional al tamaño efectivo de los dipolos, y cuyo valor está en el orden de la longitud de confinamiento transversal [de acuerdo a la condición (3.7)]. En tal caso, el ancho del kernel constituye la longitud característica en (3.18), y la elección

$$\sigma = \pi^{-1/2} \sim 0.56 \quad (3.22)$$

es razonable, ya que satisface la condición $R_1(0) = R_3(0)$ [58].

En el límite $x \gg \sigma$, donde la interacción dipolo-dipolo prima sobre la interacción de contacto, la función de respuesta decae como $\sim 1/x^3$, en concordancia con el planteamiento previo para la interacción dipolar.

Como antes, en el límite de potencial profundo expandimos la función de onda macroscópica en las funciones de Wannier centradas en los M mínimos del potencial:

$$\psi = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(t) \Phi_n(x). \quad (3.23)$$

El análisis de las integrales de traslape [56] nos lleva nuevamente a la ecuación DNLS generalizada para la evolución de la amplitud $u_n(t)$ en el sitio n -ésimo:

$$i \frac{d}{dt} u_n(t) + \kappa(u_{n+1} + u_{n-1}) + q|u_n|^2 u_n + g(|u_{n+1}|^2 + |u_{n-1}|^2) u_n = 0, \quad (3.24)$$

donde los parámetros q y g se definen ahora según

$$q = q_0 \int \int R(x - \xi) |\Phi_n(x)|^2 |\Phi_n(\xi)|^2 dx d\xi$$

$$g = g_0 \int \int R(x - \xi) |\Phi_{n\pm 1}(x)|^2 |\Phi_n(\xi)|^2 dx d\xi.$$

Estos parámetros pueden interpretarse de distintas maneras. Algunos autores identifican q con la interacción de contacto que puede suprimirse mediante las resonancias de Feshbach [58], mientras que otros lo asimilan al efecto local de la interacción dipolar [56]. En cualquier caso, una limitación de reunir las interacciones no lineales en una función de respuesta es que tanto q como g deben ser de igual signo, algo distinto a lo que ocurre si se considera la interacción de contacto aparte de la interacción dipolar.

La descripción desarrollada en este capítulo para las interacciones atómicas y dipolares (con las dos derivaciones presentadas) nos ha llevado al mismo modelo discreto general (3.24), que retiene las principales propiedades de la complejidad de un BEC, a la vez que admite el uso de las muchas herramientas analíticas y numéricas desarrolladas en las últimas décadas para el análisis de la DNLS y sus extensiones.

3.5. Consideraciones generales sobre la DNLS, sus soluciones y otros modelos relacionados.

Antes de presentar nuestros resultados, es conveniente revisar algunas propiedades y resultados importantes en relación a la ecuación discreta no lineal de Schroedinger.

3.5.1. Cantidades conservadas y estabilidad.

En su forma original normalizada (en que sólo se considera no linealidad en sitio), la DNLS es dada por⁶

$$-i \frac{\partial u_n(t)}{\partial t} = u_{n-1}(t) + u_{n+1}(t) + q |u_n(t)|^2 u_n(t), \quad (3.25)$$

⁶Es posible escalar las variables u_n y t para eliminar incluso el factor q de la DNLS. Para nuestro análisis preferimos mantener este parametro.

en que omitimos el término lineal $\epsilon \cdot u_n$ asociado a la energía de sitio en BECs o a la constante de propagación en arreglos de guías de onda⁷. Las cantidades conservadas por la ec. (3.25) son la norma y el hamiltoniano de que se deriva:

$$N = \sum_n |u_n|^2, \quad H = - \sum_n [u_n^* u_{n+1} + u_n u_{n+1}^* + q|u_n|^4], \quad (3.26)$$

Dado que sólo se tienen dos cantidades conservadas, la DNLS no es integrable, salvo en el caso de un dímero, esto es, si el tamaño del arreglo es $M = 2$. La falta de una ley de conservación de momento sugiere un comportamiento del sistema orientado más bien hacia el atrapamiento de soluciones estacionarias que a la propagación libre a través del arreglo [12]. Las leyes de conservación de la energía y la norma (equivalente a la conservación de la potencia en sistemas ópticos) pueden usarse como comprobación de la solución numérica de (3.25), pero además permiten evaluar la estabilidad y movilidad de los solitones que son soluciones de esta ecuación. En efecto, una solución cuyo centro coincide con un sitio del arreglo (solución *en sitio* o *impar*) tiene en general una energía distinta a una solución centrada entre dos sitios (solución *inter sitios* o *par*) cuando sus normas coinciden. Así, el hamiltoniano como función del centro de las soluciones localizadas (para una norma fija) varía de acuerdo a la periodicidad del arreglo y es llamado *potencial de Peierls-Nabarro* [59]. La diferencia entre el potencial de una solución par e impar es conocida como *barrera de Peierls-Nabarro* y restringe la movilidad de las soluciones. Cualitativamente, puede decirse que un solitón debe tener energía cinética suficiente para sobrepasar la barrera de Peierls-Nabarro y moverse a través del arreglo.⁸

⁷Es fácil mostrar que para $\epsilon_n = \epsilon$ constante, una transformación simple elimina este término de las ecuaciones, siendo su único efecto real una renormalización o *shift* de las frecuencias del sistema.

⁸No obstante, debemos ser cuidadosos en la interpretación de la barrera de Peierls-Nabarro. En algunos casos, las dos soluciones par e impar comparten la misma condición de estabilidad (como se verá más adelante) y la diferencia de potencial es nula. Pero entonces debe considerarse la existencia de una solución estacionaria intermedia que sí presenta una diferencia de potencial con aquéllas y tiene un efecto en la movilidad.

3.5.2. Clasificación de las soluciones localizadas.

Además de la distinción entre modos pares e impares, la clasificación usual de los solitones que son solución de la ecuación DNLS (fig. 3.6) considera si éstos son *staggered* o *unstaggered*, esto es, si entre sitios vecinos hay una diferencia de signo (de fase π) en las amplitudes, o si por el contrario el paquete de ondas oscila en fase como un todo. Los primeros pueden existir cuando el sistema presenta no linealidad desenfocante [$q < 0$ en la ec. (3.25)], mientras que los segundos se dan con no linealidad enfocante ($q > 0$). Siguiendo la clasificación propuesta por Lederer *et al* [12, 60], podemos distinguir también entre soluciones simétricas y antisimétricas. Además, cuando los efectos discretos son fuertes [61], pueden existir solitones *torcidos* (*twisted solitons*) que no tienen equivalente en sistemas continuos, ya que son la combinación de dos solitones que difieren en fase [ver fig. 3.6 (b)]. Es importante aclarar que en esta clasificación nos restringimos a solitones brillantes, es decir, en que la onda (de luz o materia según el contexto) está localizada en una región acotada; los solitones oscuros se definen por oposición, es decir, como ausencia localizada de energía dentro de un pulso ancho.

La existencia de soluciones *staggered* y *unstaggered* está relacionada con la simetría de la DNLS ante el cambio de no linealidad enfocante a desenfocante y de frecuencias positivas a negativas. En efecto, consideremos la ecuación algebraica que satisfacen las soluciones estacionarias $u_n(t) = u_n e^{i\omega t}$ (con $u_n \in \mathbb{R}$) de la ec. (3.25):

$$\omega u_n = u_{n-1} + u_{n+1} + q u_n^3. \quad (3.27)$$

Consideremos la transformación $q \rightarrow -q$, $\omega \rightarrow -\omega$:

$$-\omega u_n = u_{n-1} + u_{n+1} - q u_n^3. \quad (3.28)$$

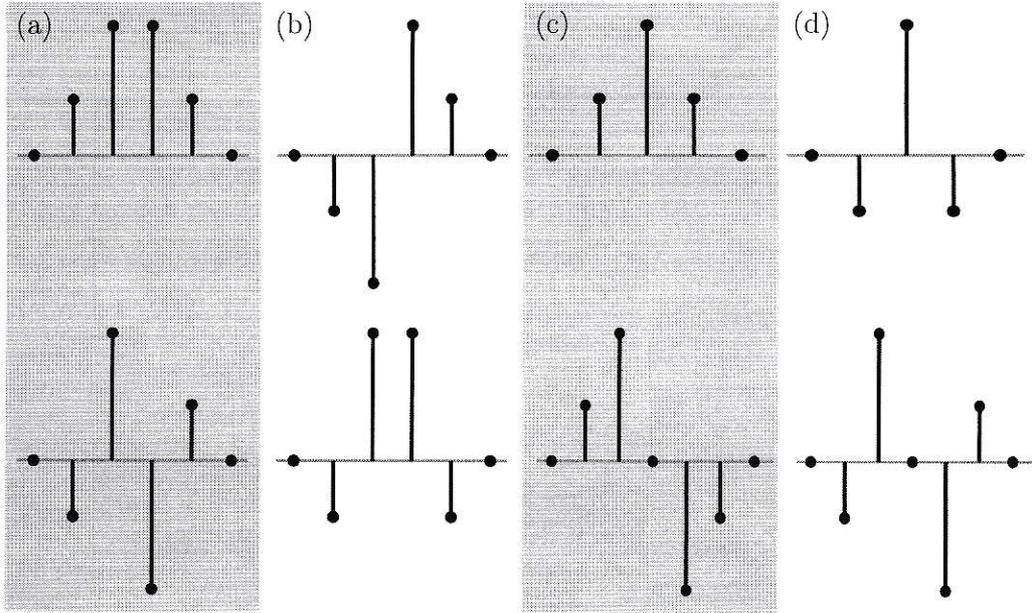


Figura 3.6: Clasificación de solitones brillantes que solucionan la ecuación DNLS. (a) Soluciones pares *unstagged* (arriba) y *stagged* (abajo). (b) Solitones torcidos pares, estables sólo para confinamiento alto. (c) Soluciones impares *unstagged* existentes para $q > 0$. (d) Soluciones impares *stagged* existentes para $q < 0$.

Para mantener la consistencia entre (3.27) y (3.28), las soluciones de esta ecuación deben presentar diferencia de signo entre las amplitudes u_n de sitios vecinos, es decir, deben ser soluciones *stagged*. Así, mediante la transformación $u_n \rightarrow (-1)^n u_n$ obtenemos

$$-\omega u_n = -u_{n-1} - u_{n+1} - q u_n^3, \quad (3.29)$$

con lo que recuperamos la ec. (3.27).

3.5.3. Generalizaciones de la DNLS.

Otra discretización de la ecuación de Schroedinger no lineal, distinta a la DNLS, es el modelo de Ablowitz-Ladik (AL) [62]

$$-i\dot{u}_n = u_{n-1} + u_{n+1} + \frac{\gamma}{2}|u_n|^2(u_{n-1} + u_{n+1}). \quad (3.30)$$

Mediante el método de *scattering inverso* [63], este modelo es completamente integrable, a diferencia de la DNLS, que lo es sólo para dos grados de libertad (dímero). No obstante, ciertas propiedades de la ecuación de AL (ver discusión en [64, 65]) han impedido su aplicación a algún sistema físico. Un modelo más general fue introducido por M. Salerno en 1992 como una *deformación* de la DNLS [66]:

$$-i\dot{u}_n = \left[1 + \frac{\gamma - \epsilon}{2} |u_n|^2 \right] (u_{n-1} + u_{n+1}) + \epsilon |u_n|^2 u_n. \quad (3.31)$$

La característica principal de este modelo es que su tanto su hamiltoniano como el correspondiente paréntesis de Poisson y la misma ecuación (3.31), dependen de forma continua en un parámetro de deformación ϵ , tal que cuando $\epsilon = 0$ el sistema se reduce al modelo de AL, mientras que para $\epsilon \rightarrow \gamma$ se obtiene la ecuación DNLS. Luego, la ec. (3.31) sólo es integrable para $\epsilon = 0$, en que el método de *scattering inverso* puede usarse, mientras que para $\epsilon \neq 0$ es posible utilizar los procedimientos empleados habitualmente en la solución de la DNLS. Al igual que ésta, el modelo deformable sí tiene aplicaciones físicas, particularmente en la propagación de excitaciones moleculares en presencia de interacción resonante y acoplamiento fonón-vibración molecular [66]. En relación a la formación de soluciones localizadas, es importante destacar que el modelo de Salerno presenta una variación de la inestabilidad modulacional (MI) de ondas planas según la relación entre los parámetros ϵ y γ [64] (la MI favorece la filamentación de frentes de onda extendidos y, por tanto, la formación de solitones discretos).

Aún con la discretización tipo DNLS, son muchas las variaciones y extensiones de la DNLS que han sido estudiadas en la literatura, además del modelo (3.24) derivado en este capítulo. Entre los ejemplos más notables, están la inclusión de términos no

lineales de distinto orden y forma [67–69], el análisis de impurezas lineales y no lineales [70–76] y la consideración de acoplamiento de largo alcance [77].

Un modelo que guarda algunas semejanzas con el que es objeto de nuestro estudio fue introducido por M. Öster *et al.* para describir arreglos de guías de onda lineales inmersas en un medio no lineal [78]. Asumiendo acoplamiento evanescente entre las guías, los autores derivaron la siguiente ecuación para la dinámica de la onda de luz en la guía n -ésima

$$\begin{aligned}
 -i\frac{d\Psi_n}{dz} + Q_1\Psi_n + Q_2(\Psi_{n-1} + \Psi_{n+1}) + 2Q_3\Psi_n|\Psi_n|^2 \\
 + 2Q_4[2\Psi_n(|\Psi_{n-1}|^2 + |\Psi_{n+1}|^2) + \Psi_n^*(\Psi_{n-1}^2 + \Psi_{n+1}^2)] \\
 + 2Q_5[2|\Psi_n|^2(\Psi_{n-1} + \Psi_{n+1}) + \Psi_n^2(\Psi_{n-1}^* + \Psi_{n+1}^*) \\
 + \Psi_{n-1}|\Psi_{n-1}|^2 + \Psi_{n+1}|\Psi_{n+1}|^2] = 0.
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Como puede verse, el factor Q_3 la ec. (3.32) es proporcional al parámetro q de (3.25) y corresponde a la no linealidad cúbica en sitio. El acoplamiento no lineal entre sitios vecinos está cuantificado por Q_4 y Q_5 e incluye varios términos además de los encontrados en nuestro modelo (3.24). De hecho, se consideran todos los posibles productos de orden cúbico entre las amplitudes Ψ_n , $\Psi_{n\pm 1}$ y sus conjugados; en cierto rango de parámetros todos ellos son no despreciables. Es importante notar que el término $|\Psi_n|^2(\Psi_{n-1} + \Psi_{n+1})$ corresponden al modelo de Ablowitz-Ladik descrito anteriormente.

Entre las principales características del modelo (3.32) está la inversión de estabilidad entre los modos impares y pares (sean éstos simétricos o antisimétricos) que ocurre sobre cierto valor del cociente Q_4/Q_5 . El intercambio está precedido por una región de biestabilidad de ambas soluciones, en que es posible encontrar un *breather* discreto inestable, cuya asimetría lo sitúa como una solución intermedia entre los modos par e impar. Éste fue el primer modelo en que se encontró una región de

parámetros donde estas dos soluciones fundamentales son simultáneamente estables. La existencia de la solución intermedia facilita la movilidad de las soluciones localizadas. Esta fenomenología es atribuida a la presencia del término con Q_4 . Por otra parte, el modelo (3.32) admite soluciones compactas (esto es, que son estrictamente nulas fuera de unos pocos sitios) debido a los términos Q_5 , entre los que se incluye la interacción tipo Ablowitz-Ladik. Si bien un modelo tan complejo no es todavía factible de ser realizado en un experimento, resulta muy ilustrativo ver cómo la extensión de la DNLS a través de términos no lineales más generales puede surgir en contextos y derivaciones muy diferentes.

Capítulo 4

Soluciones localizadas en un condensado dipolar

En los capítulos anteriores hemos tratado los elementos necesarios para modelar un condensado de Bose-Einstein (BEC) en redes ópticas, considerando dos tipos de interacciones atómicas: interacción de contacto (local) e interacción dipolar (de largo alcance). En este capítulo presentamos el método utilizado para encontrar soluciones localizadas discretas con este modelo, y nuestros resultados correspondientes¹. Vemos que en presencia de la interacción dipolar surgen propiedades interesantes, tales como regiones en el espacio de parámetros en que dos soluciones fundamentales son simultáneamente inestables, y un cambio en la norma mínima necesaria para la formación de *breathers* de superficie (soluciones localizadas en el borde de la cadena).

4.1. Generalidades.

4.1.1. Modelo.

Consideramos una cadena de M sitios (correspondientes a la posición de los mínimos del potencial periódico inducido por la red óptica). La evolución temporal de la amplitud de la onda del condensado, en el sitio n -ésimo de la cadena, está dada por

$$-i \frac{du_n(t)}{dt} = \kappa(u_{n-1} + u_{n+1}) + q|u_n|^2 u_n + g(|u_{n-1}|^2 + |u_{n+1}|^2)u_n. \quad (4.1)$$

Aquí, κ es el coeficiente de acoplamiento lineal entre sitios vecinos, q corresponde al coeficiente no lineal en sitio (relacionado con la interacción de contacto) y g denota el coeficiente de acoplamiento no lineal (asociado a la interacción dipolar de largo alcance).

El sistema (4.1) posee dos cantidades conservadas por la dinámica, a saber, la norma

$$N = \sum_n |u_n|^2 \quad (4.2)$$

¹Publicados en [58].

y el hamiltoniano

$$H = - \sum_n \left\{ \kappa u_{n+1} u_n^* + \frac{q}{4} |u_n|^4 + \frac{g}{2} |u_{n+1}|^2 |u_n|^2 + \text{c.c.} \right\}. \quad (4.3)$$

4.1.2. Inestabilidad modulacional.

La ecuación (4.1) admite ondas planas como solución, en la forma $u_n(t) = u_0 \exp(-i[kn - \omega t])$. Esto es relevante para nuestro estudio, ya que la generación de solitones discretos puede ser obtenida de forma eficiente a través de la inestabilidad modulacional (IM) de las ondas [65].

Sustituyendo en (4.1), obtenemos la siguiente relación de dispersión no lineal para las ondas planas:

$$\omega(k) = 2 \cos k + (q + 2g)u_0^2. \quad (4.4)$$

La estabilidad es analizada introduciendo una onda plana perturbada en la forma

$$u_n(t) = [u_0 + \delta u_n(t)] \exp(-i[kn - \omega t]). \quad (4.5)$$

Sustituyendo con (4.5) en (4.1) y reteniendo los términos lineales en $\delta u_n(t)$ llegamos a la ecuación de evolución para la perturbación:

$$\begin{aligned} & i \frac{d}{dt} \delta u_n + [2(q + g)u_0^2 - \omega(k)] \delta u_n + \\ & (\delta u_{n+1} e^{ik} + \delta_{n-1} \exp^{-ik}) + qu_0^2 \delta u_n^* \\ & + gu_0^2 (\delta u_{n+1} + \delta u_{n-1} + \delta u_{n+1}^* + \delta u_{n-1}^*) = 0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

La perturbación compleja $\delta u_n(t)$ puede expresarse como

$$\delta u_n(t) = u_1 e^{i(Qn + \Omega t)} + u_2^* e^{-i(Qn + \Omega t)}, \quad (4.7)$$

con lo que la ecuación de evolución lleva al siguiente sistema lineal:

$$\begin{aligned} [-\Omega - \omega(k) + a^+] u_1 + b u_2 &= 0 \\ b u_1 + [\Omega - \omega(k) + a^-] u_2 &= 0, \end{aligned} \quad (4.8)$$

con las definiciones

$$a^\pm = 2(q + g)u_0^2 + 2 \cos(Q \pm k) + 2gu_0 \cos Q$$

$$b = qu_0 + 2gu_0 \cos Q$$

$$d \equiv a^+ + a^- .$$

La existencia de soluciones no triviales de (4.8) es posible sólo si la frecuencia de la perturbación satisface la igualdad

$$\Omega = \frac{1}{2} \left(d \pm \sqrt{d^2 - 4b^2 + 4[\omega(k) - a^+][\omega(k) - a^-]} \right) . \quad (4.9)$$

A partir de esta ecuación podemos cuantificar la inestabilidad con la parte imaginaria de Ω . Es decir, definiendo $\mathcal{G} = \text{Im}\Omega$ podemos afirmar que la onda plana presenta IM si $\mathcal{G} \neq 0$. La figura 4.1 muestra la variación de \mathcal{G} en función de Q y u_0 para una onda plana uniforme ($k = 0$) y para distintos valores del parámetro de interacción dipolar g ($q = 1$). Podemos ver cómo en el caso DNLS ($g = 0$) siempre hay IM en un rango de Q ; más aún, cuando la amplitud u_0 es mayor que $\sqrt{2/q}$ las ondas planas son inestables para todo Q . Al incrementar el valor de g esta cota se va incrementando hasta diverger cuando $g = q$. Es decir, en este caso siempre hay un rango de Q en que las ondas son estables.

Como puede verse de la ecuación (4.4), el factor $q + 2g$ es importante para determinar la existencia de IM. Si fijamos q , el valor crítico $g = -q/2$ define un cambio en la estabilidad de una onda plana. Esto se muestra claramente al comparar las figs. 4.1 (c) y (d) correspondientes a $g = -0.2$ y $g = -1$. Cuando g está bajo $-q/2$ se invierte el comportamiento del caso DNLS: ahora siempre hay estabilidad en un rango de Q ; bajo un cierto valor de la amplitud u_0 , no existe IM para ningún Q .

Los resultados anteriores sugieren que para cualquier valor positivo de g (interacción dipolar repulsiva) la existencia de *breathers* discretos es posible. En tanto,

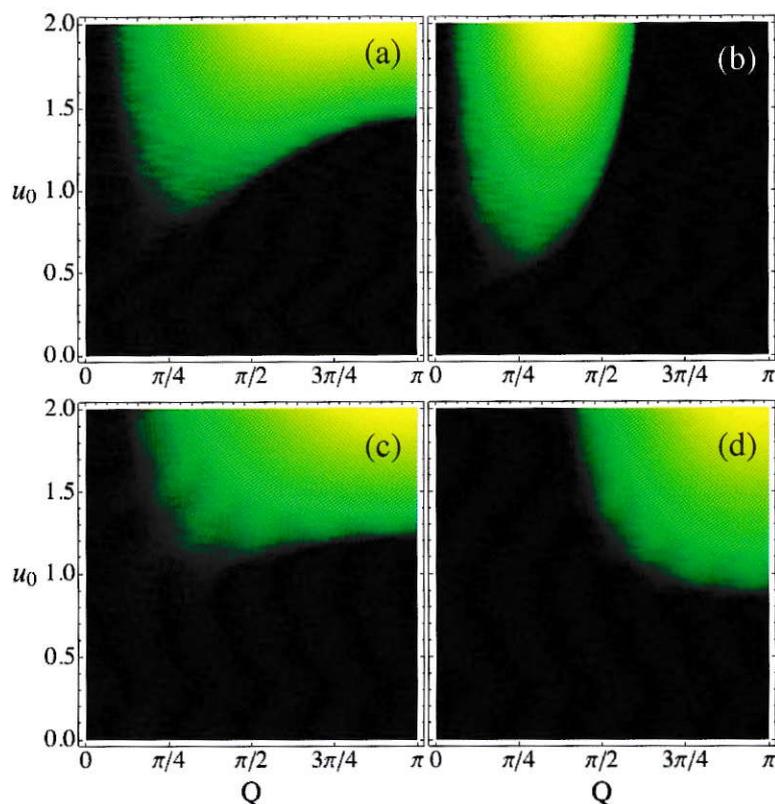


Figura 4.1: Inestabilidad modulacional en el sistema (4.1). Parámetro \mathcal{G} en función de Q y u_0 para una onda plana no lineal con $q = 1$ y distintos valores de la interacción dipolar. Las regiones en negro corresponden ondas planas estables. (a) $g = 0$ (DNLS estándar). En este caso, el estado fundamental es siempre inestable sobre cierto valor de la amplitud u_0 . (b) $g = q = 1$. (c) $g = -0.2$ y (d) $g = -1$.

para el caso $g < 0$ (interacción atractiva), la formación de soluciones localizadas no escalonadas se dificulta, requiriendo una norma mínima, como se verá más adelante.

4.2. Soluciones localizadas discretas no lineales.

A continuación, buscamos soluciones estacionarias en la forma $u_n(t) = u_n e^{i\omega t}$ con u_n real. Sustituyendo en (4.1) llegamos al siguiente sistema de ecuaciones algebraicas.

$$\omega u_n = \kappa(u_{n-1} + u_{n+1}) + qu_n^3 + g(u_{n-1}^2 + u_{n+1}^2)u_n. \quad (4.10)$$

Las ecuaciones para $n = 1$ y $n = M$ serán distintas según se consideren condiciones de borde fijas o periódicas. En lo que sigue trabajamos con condiciones de borde fijas, cumpliéndose que $u_0 = u_{M+1} = 0$.

4.2.1. Método.

Para resolver el sistema algebraico (4.10) usamos el método de Newton-Raphson, tomando como *semilla* un perfil localizado en un sitio central n_0 ,

$$u_n = \sqrt{N}\delta_{n,n_0}, \quad (4.11)$$

o bien un perfil centrado entre dos sitios n_0 y $n_0 + 1$

$$u_n = \sqrt{\frac{N}{2}}(\delta_{n,n_0} + \delta_{n,n_0+1}), \quad (4.12)$$

a los que designamos como soluciones *en sitio* o *inter sitios*, respectivamente. Ahora bien, la existencia de soluciones localizadas es debida a las interacciones presentes en el sistema a través de los términos no lineales en la ec. (4.1), que a su vez dependen fuertemente de la norma N del paquete de ondas. Por lo tanto, para encontrar soluciones localizadas, buscamos en regiones de alta norma. En sistemas modelados por ecuaciones tipo DNLS, el régimen de muy alta norma (potencia para sistemas ópticos) es conocido como *límite anticontínuo*, donde el acoplamiento entre sitios es despreciable en comparación a la energía de interacción en sitio. En este límite casi cualquier perfil (en particular uno localizado) es solución del sistema. Comenzamos buscando soluciones localizadas para valores grandes de N y para frecuencias ω muy por encima del borde de la banda lineal. Una vez encontrado un perfil $\{u_m\}$ que resuelve el sistema, reducimos levemente la frecuencia y lo utilizamos como semilla.

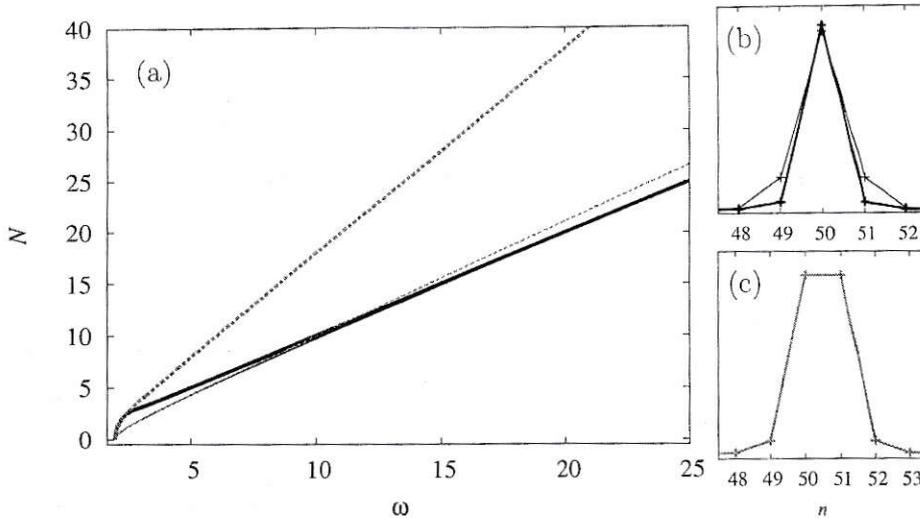


Figura 4.2: Las curvas negras y grises corresponden a las soluciones en sitio e inter sitios respectivamente, mientras que las curvas gruesas (delgadas) corresponden a $g = 0$ ($g = 0.8$). (a) Dependencia de la norma en la frecuencia. Como convención, en todos los gráficos usamos la línea continua (punteada) para indicar estabilidad (inestabilidad). (b) Solución en sitio para un valor fijo de la norma $N = 20$. Note el ensanchamiento de la solución a medida que se incrementa la interacción dipolar g . (c) Solución inter sitios. En este caso no se aprecia un incremento del ancho con g .

La iteración de este procedimiento hasta que la frecuencia llega a la banda lineal² nos lleva a contruir toda la familia de soluciones localizadas no lineales.

4.2.2. Efecto de la interacción dipolar repulsiva ($g > 0$).

La figura 4.2 muestra las curvas N vs ω para dos valores distintos del coeficiente g , y para los dos modos fundamentales en consideración. Para $g = 0$, se tiene el comportamiento propio exhibido por la ec. DNLS estándar, conviene a saber: para cualquier frecuencia $\omega > 2$ la norma de la solución inter sitios está sobre la norma de

²Como estamos trabajando con un sistema finito, la paridad del número de sitios impide la existencia de alguno de los modos (en sitio o inter sitios) muy cerca de la banda lineal: sólo una de las curvas puede continuarse exactamente hasta el borde de la banda.

la solución en sitio. Para frecuencias grandes puede verse que $N_{\text{ensitio}}/N_{\text{intersitios}} \rightarrow 2$, las curvas asintóticas N vs ω para ambas soluciones son rectas donde una pendiente es el doble de la otra. Si incrementamos g hasta un valor positivo menor que q (curvas delgadas en la fig. 4.2 para $g = 0.8q$), vemos que la curva asintótica de la solución inter sitios reduce fuertemente su pendiente, acercándose a la curva de la solución en sitio. Para $g = q$ las dos curvas se superponen y las rectas asintóticas N vs ω tienen la misma pendiente para las dos soluciones en sitio e inter sitios. Este cambio en la dependencia de la norma en la frecuencia va acompañado de un intercambio entre la estabilidad de las soluciones fundamentales, que se estudia en la sección siguiente. Además, la superposición de las pendientes implica una equivalencia en la norma y la energía de las dos soluciones para una misma frecuencia, que podría facilitar su movilidad transversal [69].

4.3. Estabilidad lineal.

Una vez encontrada una solución estacionaria $\{u_m\}$, la perturbamos añadiendo una pequeña perturbación compleja de la forma

$$\phi_m(t) = X_m(t) + iY_m(t). \quad (4.13)$$

El efecto de esta perturbación en la evolución temporal de la solución nos permitirá determinar si es linealmente estable o inestable.

La sustitución de $\{u_n\} \rightarrow \{u_n + \phi_n\}$ en (4.1) lleva a dos ecuaciones diferenciales para $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_M)$ e $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_M)$, a saber,

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{X}} + \mathbb{A}\mathbf{B}\mathbf{X} &= 0, \\ \ddot{\mathbf{Y}} + \mathbb{B}\mathbf{A}\mathbf{Y} &= 0, \end{aligned} \quad (4.14)$$

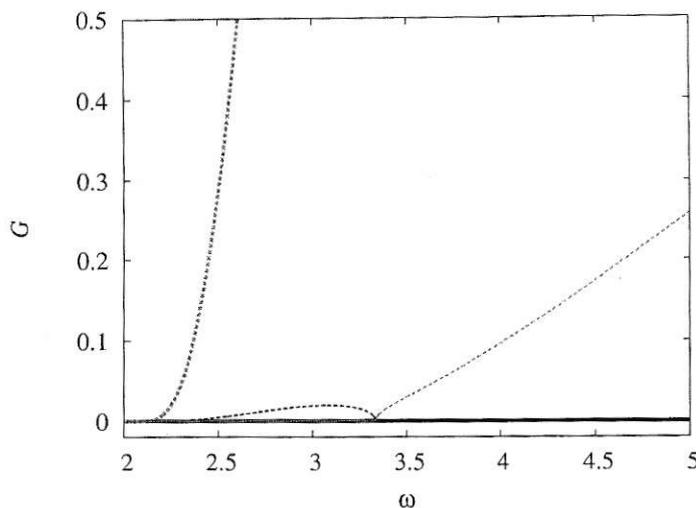


Figura 4.3: Estabilidad como función de ω para la solución en sitio (curva negra) e inter sitios (curva gris). Las líneas gruesas corresponden a $g = 0$, y las delgadas a $g = 0.8$. Podemos ver el aparente intercambio de estabilidad entre las soluciones fundamentales para $g = 0.8$

donde \mathbb{A} y \mathbb{B} son dos matrices de orden $M \times M$ definidas como sigue.

$$\begin{aligned}
 A_{nm} &= [qu_n^2 + g(u_{n-1}^2 + u_{m-1}^2) - \lambda] \delta_{n,m} \\
 &\quad + \kappa (\delta_{n-1,m} + \delta_{n+1,m}) \\
 B_{nm} &= [3qu_n^2 + g(u_{n-1}^2 + u_{m-1}^2) - \lambda] \delta_{n,m} \\
 &\quad + (\kappa + 2gu_n u_{n-1}) \delta_{n-1,m} \\
 &\quad + (\kappa + 2gu_n u_{n+1}) \delta_{n+1,m}.
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Dado que las matrices $\mathbb{A}\mathbb{B}$ y $\mathbb{B}\mathbb{A}$ tienen los mismos autovalores $\{\lambda_k\}$, podemos elegir cualquiera de ellas para estudiar la estabilidad. Si algún autovalor tiene parte imaginaria positiva, la perturbación crecerá en el tiempo, de modo que, en tal caso, la solución estacionaria $\{u_n\}$ será inestable. Entonces, definimos la ganancia

$$G = \max\{\text{Im}(\lambda_k)\} \tag{4.16}$$

como parámetro para cuantificar la inestabilidad de una solución, de modo que las soluciones estables tienen $G = 0$. La figura 4.3 muestra el cambio en las curvas G vs ω a medida que se incrementa la interacción dipolar. Para $g = 0$ (límite DNLS) la solución en sitio es siempre estable, mientras que la inter sitios es inestable. Si aumentamos el valor de g , la estabilidad de las soluciones empieza a cambiar: aparece un rango de frecuencias bajas en que la solución en sitio (inter sitios) se vuelve inestable (estable). Desde un cierto valor de ω , las soluciones intercambian estabilidad y reaparece la fenomenología anterior del sistema ($g = 0$). No obstante, el intercambio de estabilidad entre los modos fundamentales no es inmediato; más bien, existe una región de parámetros (frecuencia y norma) sobre la cual las dos soluciones son inestables simultáneamente (ver fig. 4.4). Esta región de bi-inestabilidad se ensancha cuando g tiende a q , a la vez que se desplaza hacia frecuencias (y normas) más altas (fig. 4.5).

Esta fenomenología está presente en varios sistemas físicos que exhiben un rango de parámetros donde dos soluciones fundamentales son estables [69] o inestables [78] simultáneamente. Que dos soluciones compartan la misma condición de estabilidad para la misma frecuencia o norma implica la existencia de una *solución estacionaria intermedia* (SI) con la condición de estabilidad opuesta a las otras dos. En nuestro caso, esto implica que en la región de bi-inestabilidad debe existir una SI estable. Encontrarla no es trivial; sin embargo, podemos utilizar el hecho de que toda solución estacionaria debe ser un punto extremo del hamiltoniano con respecto a los parámetros que caracterizan un paquete de ondas. A continuación explicamos el *método del constraint*, que aprovecha este principio para construir el *potencial efectivo* que la SI debe minimizar o maximizar, dependiendo de su estabilidad.

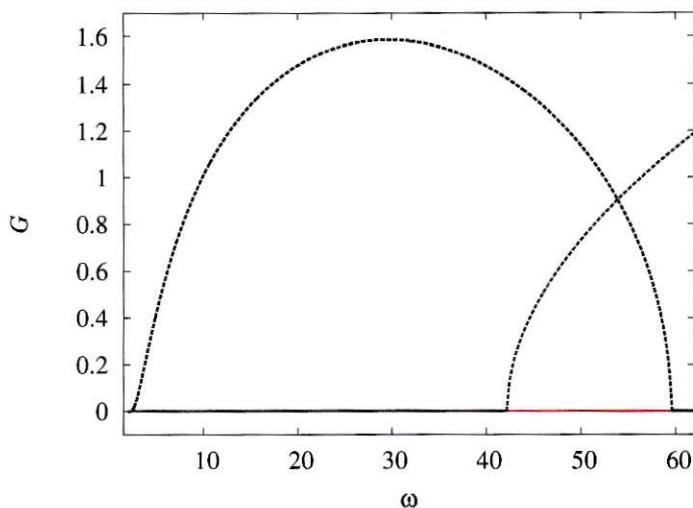


Figura 4.4: Estabilidad como función de ω para la solución en sitio (curva negra) e inter sitios (curva gris oscuro) y $g = 0.96$ y $q = 1$. La curva gris claro corresponde a la solución intermedia, que es estacionaria en la región de bi-inestabilidad.

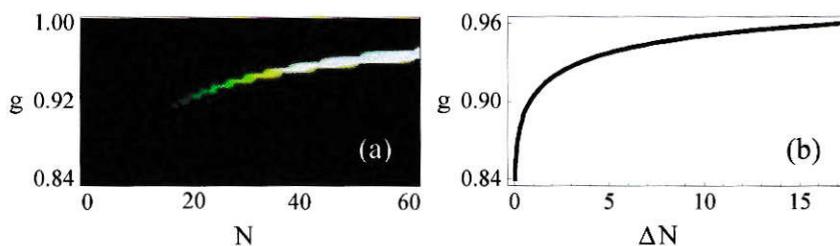


Figura 4.5: (a) Región de bi-inestabilidad en función del parámetro de interacción dipolar y la norma. (b) Relación entre el rango de norma ΔN sobre el cual hay bi-inestabilidad y el parámetro g .

4.4. Método del constraint.

Cualquier perfil $\{u_n\}$ puede ser caracterizado por su *centro de masa* definido como

$$\rho = \frac{\sum_n n |u_n|^2}{N}. \quad (4.17)$$

Con el método del constraint, buscamos calcular el potencial $H(\rho)$, esto es, el hamiltoniano como función de ρ . Si las soluciones en sitio e inter sitios son simultáneamente estables (inestables), corresponderán a mínimos (máximos) de $H(\rho)$, siendo la SI un máximo (mínimo) entre aquellas. La implementación del método del constraint consiste en los siguientes pasos:

(i) Para un valor fijo de la norma N , resolvemos el sistema algebraico

$$\omega u_n = f_n(u_1, u_2, \dots, u_M), \quad m = 1, 2, \dots, M, \quad (4.18)$$

asociados con las ecuaciones diferenciales que rigen el sistema [ec. (4.10) en nuestro caso], y obtenemos un modo estacionario en sitio (entre sitios) centrado en n_0 (en $n_0 + 1/2$). Si n_0 es algún sitio cercano a la mitad de la cadena, entonces el centro de masa definido por (4.17) será n_0 ó $n_0 + 1/2$ para el modo en sitio o inter sitios, respectivamente. En lo que sigue, nos referiremos sólo al primer caso, es decir, comenzamos con un perfil $\{u_n\}$ correspondiente a la solución en sitio centrada en n_0 . Notese que el centro de masa de la solución intermedia deberá ser un valor entre n_0 y $n_0 + 1/2$ (fuera de esta región, el potencial se repetirá debido a la periodicidad del sistema).

(ii) A continuación, escogemos un sitio próximo a n_0 , digamos \bar{n} , y despejamos la amplitud correspondiente $u_{\bar{n}} = A$ de la ecuación (4.17):

$$A = \sqrt{N\rho - \sum_{n \neq \bar{n}} n u_n^2}. \quad (4.19)$$

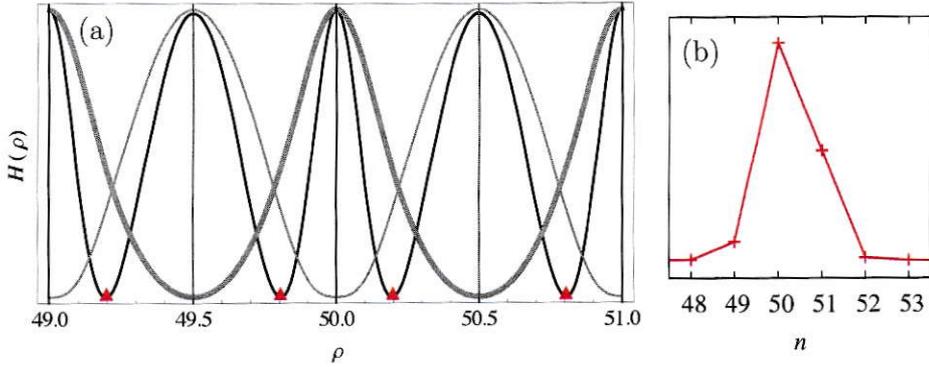


Figura 4.6: (a) Potencial efectivo para tres valores distintos de la norma N . La curva gris delgada corresponde a $N = 35$, la negra a $N = 48$ (región de bi-inestabilidad), y la gris gruesa a $N = 61$. (b) Solución intermedia correspondiente a los mínimos del potencial efectivo para $N = 48$.

Así, A queda expresada en función de las amplitudes restantes, de la norma y del centro de masa. Ahora tomamos $M - 1$ ecuaciones del sistema algebraico original, a saber, las de índice $i = 1, 2, \dots, \bar{n} - 1, \bar{n} + 1, \dots, M$, y en todas ellas reemplazamos $u_{\bar{n}}$ con la amplitud A definida según (4.19). A este sistema de ecuaciones añadimos la restricción (*constraint*)

$$A^2 + \sum_{n \neq \bar{n}} u_n^2 = N, \quad (4.20)$$

esto es, la condición de que la norma esté fija. De este modo, tenemos un sistema de M ecuaciones para M variables: las amplitudes u_n , $n \neq \bar{n}$, y la frecuencia ω .

(iii) Ahora aumentamos en pequeños pasos el valor de ρ para obtener soluciones en el rango $n_0 < \rho \leq n_0 + 1/2$ (esto es, para mover el centro de masa desde la solución en sitio a la inter sitios). En cada iteración, resolvemos el sistema algebraico tomando la solución anterior $\{u_1, u_2, \dots, u_{\bar{n}-1}, u_{\bar{n}+1}, \dots, u_M, \omega\}$ como semilla y obtenemos una nueva solución para el valor ρ respectivo. Evaluando el hamiltoniano en cada punto, construimos el potencial efectivo $H(\rho)$ para la norma dada N . Todos los extremos de $H(\rho)$ corresponden a soluciones estacionarias del sistema.

La fig. 4.6 (a) ilustra la construcción del potencial efectivo $H(\rho)$ para tres diferentes valores de la norma N y para $g = 0.96$, mostrando perfecta concordancia con el análisis de estabilidad presentado supra (el tamaño de la cadena es $M = 100$, y elegimos $n_0 = 50$). Cuando la norma es baja (curva gris gruesa), el potencial efectivo tiene un máximo en los valores enteros de ρ (en particular en n_0), que son centros de masa de soluciones en sitio inestables. Los mínimos en ρ semienteros (como $n_0 \pm 1/2$) están asociados a las soluciones inter sitio, que son estables. En la región donde los modos en sitio e inter sitios son simultáneamente inestables (línea negra), ambos corresponden a un máximo. La solución intermedia estable aparece como un mínimo centrado entre las dos soluciones fundamentales [triángulos en la figura 4.6 (a); el perfil de intensidad de la respectiva solución intermedia se muestra en 4.6 (b)]. Al incrementar la norma (curva delgada gris), el análisis de estabilidad predice que la solución en sitio (entre sitios) se vuelve estable (inestable): ahora hay un mínimo en los valores enteros de ρ y un máximo en los semienteros.

4.5. Interacción dipolar atractiva ($g < 0$).

Cuando los dipolos están orientados longitudinalmente (sec. 3.3) la interacción dipolar es atractiva, lo que se traduce en un valor negativo para el coeficiente g . Observamos que para $g \lesssim -0.3$ la curva N vs ω para la solución en sitio deja de ser monótona: aparece un mínimo local, el cual implica un cambio en las propiedades de este modo, que pasa de ser estable a ser inestable. En la figura 4.7 (a) se muestra cómo cerca de ese punto la solución en sitio se fusiona con la inter sitios, decayendo juntas en norma hacia el borde de la banda lineal ($\omega = 2$). En esta última sección de las curvas, la solución en sitio vuelve a ser estable, dado que nuevamente su curvatura ha cambiado. Reduciendo el valor de g un poco más, aparece también un mínimo en

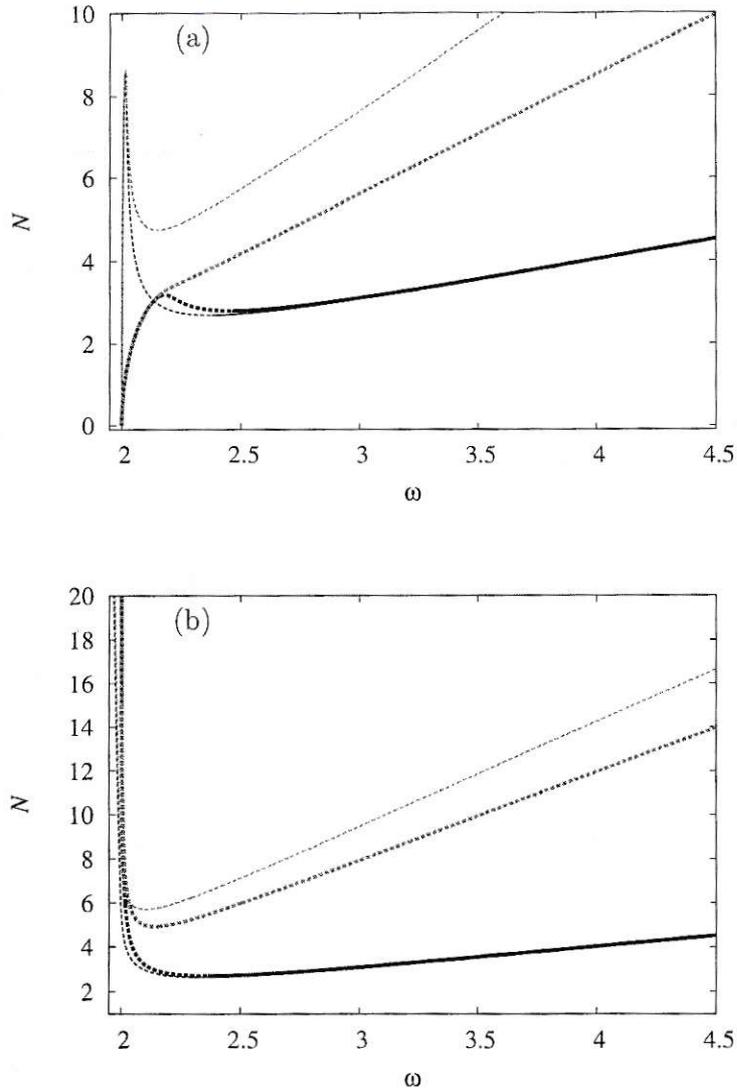


Figura 4.7: Norma vs frecuencia para interacción dipolar atractiva. La estabilidad es indicada con la continuidad de la curva, siguiendo la convención. (a) La línea gruesa corresponde a $g = -0.3$ y la delgada a $g = -0.48$. (b) La línea gruesa (delgada) corresponde a $g = -0.5$ (a $g = -0.58$).

la curva de la solución inter sitios. No obstante, las curvas de los dos modos aún se fusionan y decaen de forma muy abrupta hacia la banda lineal, con una pendiente que crece indefinidamente a medida que $g \rightarrow -0.5$ [línea delgada en la fig. 4.7 (a)].

Ahora bien, cuando se alcanza el valor crítico $g = -0.5$, el mínimo en cada curva pasa a ser global, ya que desde esos puntos respectivos ambas soluciones incrementan su norma con pendiente infinita cuando $\omega \rightarrow 2$ [curva gruesa en la fig. 4.7 (b)]. Para cualquier valor de g bajo -0.5 , las curvas de ambas soluciones cruzan el borde de la banda ($\omega = 2$) y entran en ella sin fusionarse, apareciendo así una rama en la familia de cada solución que se origina en $\omega = 2$ y cuya relación norma vs frecuencia se aproxima a una recta con pendiente negativa.

Esta dependencia en la norma es la que se espera para el modo fundamental a partir de la relación de dispersión (4.4) cuando $g < -0.5$, es decir, cuando $q + 2g < 0$. En efecto, si aproximamos la norma del modo fundamental como M veces el cuadrado de la amplitud u_0 ,

$$N_{g.s.} = Mu_0^2, \quad (4.21)$$

la ec. (4.4) nos indica que la norma del estado fundamental varía con la frecuencia según

$$N_{g.s.}(\omega) = \frac{\omega - 2}{q + 2g}. \quad (4.22)$$

Esto corresponde a una relación lineal desde $\omega = 2$, cuya pendiente es inversamente proporcional a $q + 2g$. Así, cuando g toma el valor $-q/2$, la norma diverge, tal como ocurre con las soluciones localizadas. Para $g < -q/2$, la pendiente sigue variando de la misma forma. La semejanza existente entre ondas planas y soluciones localizadas, en relación a la dependencia de la norma en la frecuencia, puede vincularse al cambio en la inestabilidad modulacional que ocurre en el valor crítico $g = -q/2$ (sec. 4.1).

La formación de *breathers* se ve perjudicada frente a la estabilidad que adquieren los modos extendidos.

4.6. Aproximación de modos fuertemente localizados.

Las ecuaciones tipo DNLS presentan un obstáculo al tratamiento analítico: no son integrables. No obstante, el uso de ciertas aproximaciones permite encontrar expresiones simples para las relaciones entre las variables relevantes para la caracterización del sistema que queremos describir. Una de esas herramientas analíticas es la *aproximación de modos fuertemente localizados* (SLM), que permite expresar la norma de las soluciones localizadas en función de la frecuencia. Éste método — aplicado en lo que sigue sobre nuestro modelo (4.1) — ha sido utilizado exitosamente en diversos estudios [35, 58, 77].

La aproximación de modos fuertemente localizados consiste en lo siguiente: usamos como *ansatz* para la solución de (4.1) un perfil centrado ya en uno, ya en dos sitios; al reemplazar en (4.1) para un n cercano al centro de la cadena, podemos encontrar relaciones entre la norma y la frecuencia válidas en distintos regímenes, basados en la suposición de que un aumento en la norma favorece la existencia de soluciones localizadas [79].

En primer lugar, suponemos una solución estacionaria en sitio, localizada alrededor de $n = n_0$, es decir,

$$u_n(t) = A \exp(i\lambda t) [\delta_{n,n_0} + \alpha(\delta_{n,n_0-1} + \delta_{n,n_0+1})] , \quad (4.23)$$

con $|\alpha| < 1$. Sustituyendo en (4.1) para $n = n_0$ y dividiendo entre A obtenemos

$$\lambda = 2\kappa\alpha + [q + 2g\alpha^2]A^2 . \quad (4.24)$$

Dos casos límite pueden ser considerados. Primero, cuando la norma es alta, suponemos que las soluciones son muy localizadas. Luego, $\alpha \rightarrow 0$ y la norma cumple

$$N_1^a \simeq A^2. \quad (4.25)$$

Despejando A^2 de (4.24) y reemplazando en (4.25) obtenemos la dependencia de la norma alta en la frecuencia para un perfil en sitio:

$$N_1^a(\lambda) \simeq \frac{\lambda}{q}. \quad (4.26)$$

Esto nos indica una relación asintótica lineal entre la norma N^a y la frecuencia λ , en que la pendiente no depende de g sino sólo de q (de hecho, es la misma solución obtenida en el límite DNLS, $g \rightarrow 0$).

Ahora bien, a pesar de que el *ansatz* usado en la aproximación supone que sólo hay amplitud no nula en los sitios centrales, es posible analizar el límite de norma baja, donde los modos localizados dejan de serlo, volviéndose completamente extendidos debido a su proximidad a la banda lineal. En este caso, consideramos $\alpha \simeq 1$ y obtenemos la relación

$$N_1^b \simeq MA^2, \quad (4.27)$$

De (4.24) y (4.27) se sigue que

$$N_1^b \simeq M \frac{\lambda - 2\kappa}{q + 2g}. \quad (4.28)$$

Esta relación para norma baja tiene la dependencia en $q + 2g$ en el denominador, tal como la que encontramos para ondas planas en la sección anterior (y que coincide con los resultados numéricos para las soluciones localizadas). Asimismo, indica que la norma es nula cuando $\lambda = 2\kappa$, esto es, en el borde de la banda lineal.

En segundo lugar, tomamos como *ansatz* una solución estacionaria localizada *inter sitios*, de la forma

$$u_n(t) = A \exp(i\lambda t) [\delta_{n,n_0} + \delta_{n,n_0+1} + \alpha(\delta_{n,n_0-1} + \delta_{n,n_0+2})] , \quad (4.29)$$

es decir, en que dos sitios centrales tienen amplitud máxima. Sustituyendo en (4.1) para el sitio n_0 obtenemos

$$\lambda = 1 + \kappa\alpha + (q + g)A^2 + g\alpha^2 A^2 . \quad (4.30)$$

La norma alta para la solución inter sitios viene dada por

$$N_2^a \simeq 2A^2 , \quad (4.31)$$

donde se consideró $\alpha \rightarrow 0$. Tomando esta misma aproximación en (4.30) y despejando A^2 podemos concluir la relación asintótica entre la norma y la frecuencia para la solución inter sitios:

$$N_2^a = \frac{2\lambda}{q + g} . \quad (4.32)$$

Vemos que también se trata de una relación lineal, pero esta vez la pendiente disminuye a medida que aumenta g . En efecto, cuando $g = 0$ se tiene que la pendiente en (4.32) es $2/q$, el doble de la pendiente en (4.26) para la solución en sitio, lo que corresponde exactamente al caso DNLS. Cuando $g = q$, ambas pendientes son iguales, lo que también está en concordancia con nuestros resultados. Finalmente, para norma baja ($\alpha \sim 1$), recuperamos la misma relación (4.28) de la solución en sitio, cumpliéndose así que las dos soluciones convergen juntas a la banda lineal.

En conclusión, la aproximación de modos fuertemente localizados permite estimar y corroborar una parte importante de nuestros resultados numéricos presentados en este capítulo.

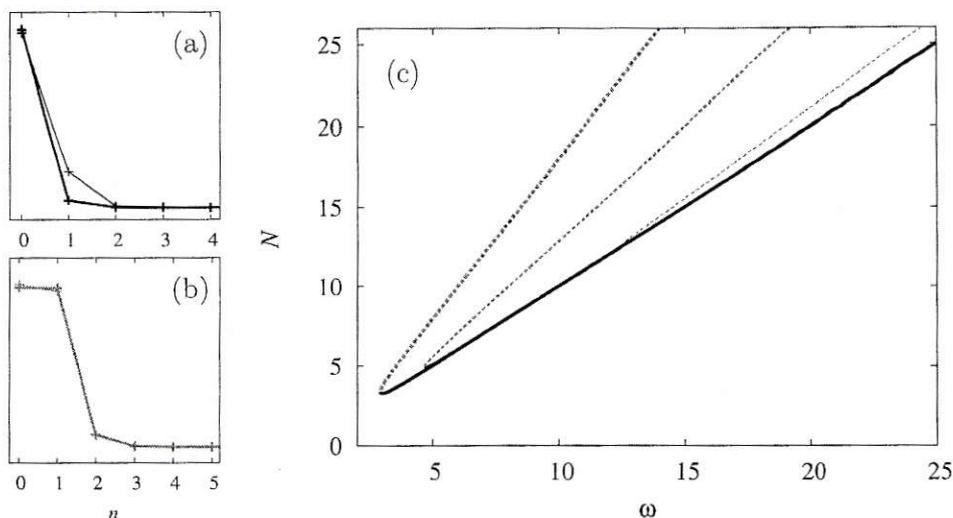


Figura 4.8: La curva negra (gris) indica el modo centrado en el primer sitio (entre el primero y el segundo de los sitios) de la cadena. La línea gruesa corresponde a $g = 0$, la media a $g = 0.4$ y la más delgada a $g = 0.8$. (a) Solución en el primer sitio para una norma fija. Al igual que la solución en sitio del *bulk*, la solución se ensancha a medida que se incrementa la interacción dipolar g . (b) Solución inter sitios superficial. (c) Dependencia de la norma en la frecuencia para ambas soluciones.

4.7. Modos de superficie.

Finalmente, aplicamos nuestro método a la búsqueda de *modos de superficie*, esto es, soluciones estacionarias cuya amplitud máxima está situada cerca del borde (primer sitio) de la cadena. En el modelo cúbico (con $g = 0$) las propiedades de tales soluciones han sido ampliamente estudiadas, llevando a resultados manifiestos. Por ejemplo, es conocido el hecho de que las soluciones localizadas en la superficie son posibles sólo si su norma está sobre un valor mínimo o *umbral* N_{cr} . En la ref. [80] se determinó la variación del umbral de acuerdo a la posición de la solución localizada, utilizando el método del *constraint* (sec. 4.4). La frecuencia correspondiente al umbral define además un cambio en la estabilidad de la solución superficial en sitio,

que cerca de ese punto se conecta con la solución inter sitios, siendo ésta inestable en todo el rango de norma y frecuencia. Ambos modos se muestran en la figura 4.8 (a) y (b).

A medida que incrementamos el valor de g , observamos que el umbral N_{cr} aumenta también (tal como en la sección 4.2.2, fijamos el coeficiente de interacción local $q = 1$ para todos nuestros cálculos). En otras palabras, *es más difícil sustentar una solución localizada en la superficie si las interacciones dipolares de largo alcance están presentes*. El creciente carácter repulsivo de la superficie se hace evidente en los diagramas de norma versus frecuencia [fig. 4.8 (c)] en que puede apreciarse el cambio en la pendiente de la curva correspondiente a la solución en sitio (coincidente con el cambio de estabilidad mencionado anteriormente), que se fusiona con la curva de la solución inter sitios cerca del umbral. Por esta razón, la divergencia de N_{cr} a medida que $g \rightarrow q$ implica la desaparición de ambas soluciones fundamentales: para $g \geq q$ *no existen modos localizados de superficie* (en sitio o inter sitios).

De otra parte, cuando g es negativo (esto es, cuando consideramos interacciones dipolares atractivas), el umbral decrece. Esto puede apreciarse en la fig. 4.9 para $g = -0.4$ (segunda línea más gruesa), donde se ve que las soluciones en sitio e inter sitios se conectan cerca del umbral tal como en el caso DNLS. Esto se cumple siempre que g está sobre -0.5 . Para este valor (segunda curva más delgada en la fig. 4.9) las curvas N vs ω de las dos soluciones fundamentales tienden a la banda lineal, pero divergen cuando $\omega \rightarrow 2+$ (borde de la banda para cadenas infinitas), perdiéndose la bifurcación de ambas soluciones a partir de un perfil común. Si disminuimos g bajo -0.5 , las curvas de las dos soluciones se extienden independientemente incluso bajo $\omega = 2$, divergiendo ambas con una pendiente que decrece con g . En este contexto, observamos que la norma con que la solución inter sitios entra a la banda se incrementa

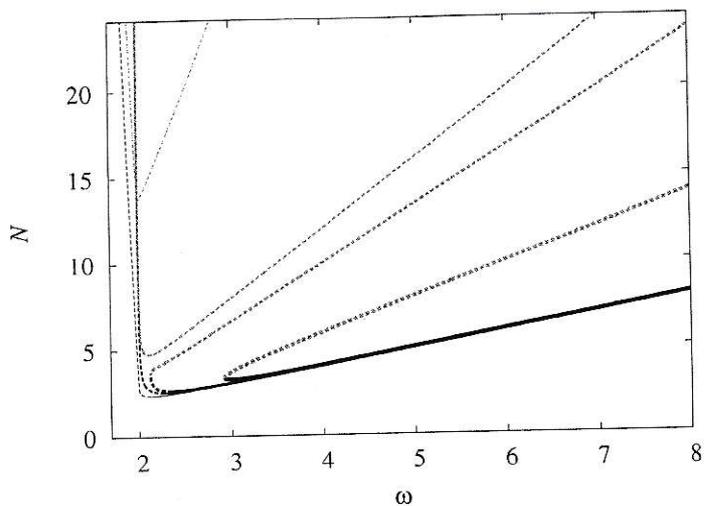


Figura 4.9: Dependencia de la norma en la frecuencia para interacción dipolar atractiva. La curva negra (azul) indica el modo centrado en el primero y el segundo de los sitios de la cadena. Las líneas desde la más gruesa a la más delgada corresponden a $g = 0$, $g = -0.4$, $g = -0.5$ y $g = -0.85$.

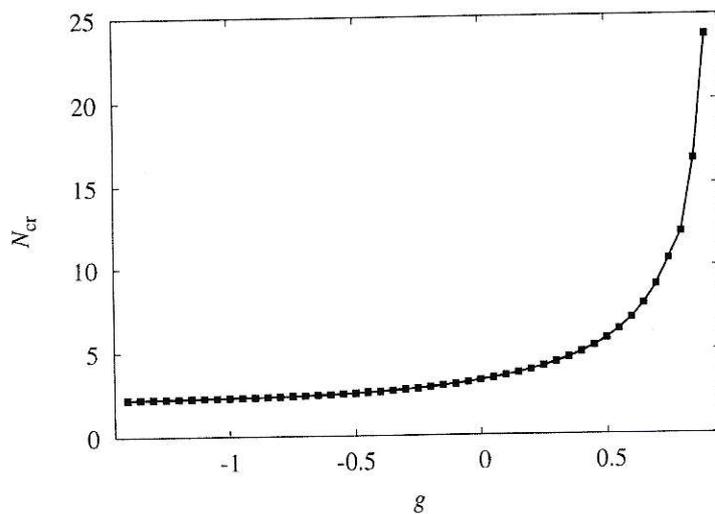


Figura 4.10: Umbral de norma versus magnitud de interacción dipolar para $q = 1$.

mientras g disminuye, lo que coincide con un aumento de la pendiente de su curva N vs ω . Se completa así la fenomenología observada para valores positivos de g , en que la pendiente de la solución inter sitios decrece a medida que aumenta la interacción dipolar. El umbral de norma (correspondiente al mínimo en la curva para la solución inter sitios) disminuye cada vez menos, manteniéndose en un valor cercano a 2. La fig. 4.10 muestra la dependencia del umbral con respecto a g , resumiendo nuestras observaciones previas.

Tal como ocurría con las soluciones en el *bulk*, para una norma fija la solución en sitio de superficie se ensancha al aumentar el valor de g y se agudiza al reducirlo hasta valores negativos. Los modos inter sitios, en tanto, mantienen casi la misma forma para una cierta norma, independientemente de la magnitud de la interacción dipolar.

4.8. Conclusiones.

Hemos estudiado el modelo (4.1) — una generalización de la ecuación DNLS, utilizado para describir un condensado de Bose-Einstein con interacciones atómicas dipolares en presencia de un potencial óptico periódico. En primer lugar, encontramos modos estacionarios localizados (*breathers* discretos) de dos tipos: centrados en un sitio central de la cadena (soluciones en sitio) o entre dos sitios centrales (soluciones inter sitios). Caracterizamos estos modos a través de la relación entre la norma y la frecuencia. Observamos que al incrementar la interacción dipolar, la pendiente asintótica de la curva N vs ω para la solución inter sitios decrece, acercándose a la curva de la solución en sitio. Cuando la interacción dipolar equipara la interacción atómica de contacto ($q = g$ en nuestro modelo) las dos curvas se superponen. Esto coincide con un intercambio en la estabilidad de las soluciones, que ocurre a

frecuencias cada vez menores a medida que g se aproxima a q . Más precisamente, el intercambio se produce en un rango de frecuencias donde los dos modos son simultáneamente inestables. Luego, existe una solución intermedia estable centrada entre las soluciones en sitio e inter sitios. Para encontrar la solución intermedia, utilizamos el método del constraint (explicado en sec. 4.4) que permite expresar el hamiltoniano (llamado potencial efectivo en este contexto) como función del *centro de masa* de las soluciones localizadas en la cadena, para una norma fija. Los puntos extremos del potencial corresponden exactamente a las soluciones estacionarias del sistema, permitiendo no sólo encontrar la solución intermedia, sino además comprobar su estabilidad.

Al considerar interacción dipolar atractiva (reduciendo el parámetro g a valores negativos) la curva de norma vs frecuencia para el modo par incrementa su pendiente asintótica hasta diverger cuando $g \rightarrow -q$, con lo queda completo el cuadro observado para interacción dipolar atractiva. La forma en que las curvas de ambos modos se aproximan a la banda lineal (cuyo borde corresponde a la frecuencia $\omega \sim 2$) cambia notablemente alrededor de $g = -q/2$. Para interacción bajo ese valor, al reducir la frecuencia las familias de soluciones entran a la banda con norma no nula y sin converger a un perfil común. Alrededor de esa transición, observamos una semejanza en la relación norma/frecuencia de las soluciones localizadas con la de las ondas planas (el valor $g = -q/2$ también supone un cambio en la inestabilidad modulacional de éstas, ver sec. 4.1).

Finalmente, estudiamos modos localizados de superficie. El principal efecto de la interacción dipolar en este caso consiste en el incremento (decrecimiento) del umbral de norma sobre el cual existen las soluciones localizadas al aumentar (reducir) la interacción dipolar. Es decir, cuanto mayor es esta interacción (cuando es repulsiva),

es más difícil sustentar soluciones localizadas en el borde de la cadena. Para $g = q$ el umbral diverge, por lo cual no es posible encontrar modos localizados sobre este valor de g . Además, se mantiene el efecto de la interacción en la pendiente de la curva asintótica para el correspondiente modo inter sitios, mostrando la robustez de nuestros resultados.

Capítulo 5

Desorden y no linealidad

A continuación estudiamos el caso en que el potencial óptico que contiene al condensado es desordenado; es decir, en que pierde la periodicidad que le fue atribuida en los capítulos anteriores. Esto se traduce en una distribución aleatoria de las energías de sitio y/o de las constantes de acoplamiento definidas en nuestro modelo. La combinación de no linealidad local (cúbica) y desorden lineal da origen a una fenomenología novedosa que está lejos de haber sido estudiada completamente. La presencia de desorden en la red induce la localización de Anderson, por la cual los modos normales de oscilación (MNs) están localizados espacialmente. En un primer acercamiento, esto puede llevar a la conclusión de que, en un sistema desordenado, la difusión de paquetes de onda sólo se ve dificultada a medida que el desorden se incrementa.

Por otra parte, es conocido el efecto de la respuesta no lineal en la localización: la no linealidad sustenta el autoatrapamiento de los paquetes de onda, al desacoplar las frecuencias de las soluciones y llevarlas a los *gaps* entre las bandas lineales. Por esta razón, podríamos inferir como primera conclusión que la combinación de desorden y no linealidad sólo favorecería la localización y perjudicaría la difusión.

El propósito de este capítulo es comparar los efectos de desorden diagonal y desorden no diagonal, dentro del marco de los sistemas discretos descritos por la DNLS, y caracterizar el efecto de variar la no linealidad presente en el sistema. Para el estudio de la difusión de paquetes de ondas en presencia de desorden (en el caso lineal y no lineal) nos basamos principalmente en el método presentado en la referencia [81], donde sólo se consideró desorden diagonal y no linealidad variable. Dado que los sistemas desordenados no lineales dificultan el uso de herramientas analíticas, nuestro acercamiento sigue siendo la implementación de métodos numéricos y nuestro análisis, a diferencia de los capítulos anteriores, es ahora principalmente cualitativo.

5.1. Modelo.

Para el caso totalmente general, en que el desorden puede ser tanto diagonal como no diagonal, no sólo la energía de sitio, sino también la constante de acoplamiento pueden cambiar según la posición. Luego, la dinámica de la amplitud de onda en el sitio n -ésimo de la red es descrita por la ecuación

$$-i\frac{\partial u_n}{\partial t} = \epsilon_n u_n + \kappa_n u_{n+1} + \kappa_{n-1} u_{n-1} + q|u_n|^2 u_n. \quad (5.1)$$

El coeficiente κ_n es la constante de acoplamiento entre los sitios n y $n + 1$, y, como antes, ϵ_n denota la energía de sitio en la posición n -ésima, mientras que q es el coeficiente que cuantifica la fuerza de interacción atómica. En nuestro estudio consideramos dos tipos de desorden separadamente y en conjunto, a saber, (i) $\kappa_n = 1$ y ϵ_n elegida al azar en el rango $[-W/2, W/2]$ (desorden diagonal), y (ii) $\epsilon_n = 0$ y κ_n escogido aleatoriamente en la distribución uniforme $[1 - W/2, 1 + W/2]$, con $W \leq 2$ (desorden no diagonal). En ambos casos, el parámetro W queda definido como el

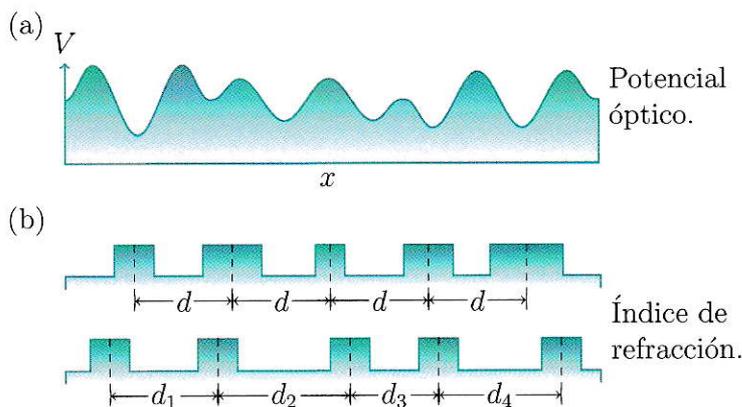


Figura 5.1: Implementación de desorden en un arreglo. (a) En un BEC, el desorden en el potencial óptico implica tanto desorden diagonal como no diagonal. (b) Implementación de desorden diagonal (arriba) y no diagonal (abajo) en un arreglo de guías de onda, cambiando el ancho y la separación entre las guías, respectivamente.

grado o la *fuerza* de desorden. La figura 5.1 ilustra la implementación de sistemas desordenados en dos medios distintos.

La norma

$$N = \sum_{n=1}^M |u_n|^2 \quad (5.2)$$

(correspondiente a la potencia de la luz en sistemas de guías de onda) es una cantidad conservada del sistema — en tanto proporcional al número de partículas del BEC, así como el hamiltoniano (sólo en el caso en que q es constante)

$$H = - \sum_{n=1}^M \left[\kappa_n (u_{n+1} u_n^* + u_{n+1}^* u_n) + \frac{q}{4} |u_n|^4 \right]. \quad (5.3)$$

El parámetro que usamos para cuantificar la localización de un paquete de ondas en la cadena es el *número de participación*:

$$R = \frac{(\sum |u_n|^2)^2}{\sum |u_n|^4} = \frac{N^2}{\sum |u_n|^4}, \quad (5.4)$$

que da una estimación gruesa del número de sitios en que el paquete de ondas tiene una amplitud significativa. Por ejemplo, para un perfil consistente de una excitación en un solo sitio, el número de participación es igual a 1; mientras que para un perfil completamente extendido, esto es, en que todos los sitios tienen igual amplitud, el número de participación resulta ser igual al número de sitios M . Como se verá en las secciones siguientes, el número de participación resulta ser una cantidad adecuada para cuantificar la distribución de un paquete de ondas sobre un sistema finito.¹

5.2. Modos lineales.

Con el fin de distinguir el efecto del desorden en los casos (i) y (ii), estudiamos primero el sistema lineal ($q = 0$). Para los modos estacionarios $u_n(z) = U_n \exp(-i\lambda t)$

¹Otras cantidades usadas en la literatura con este propósito son la longitud de localización de los MNs y el segundo momento. No obstante, ambas sólo tienen sentido en sistemas muy grandes, que no pueden ser implementados experimentalmente hoy en día.

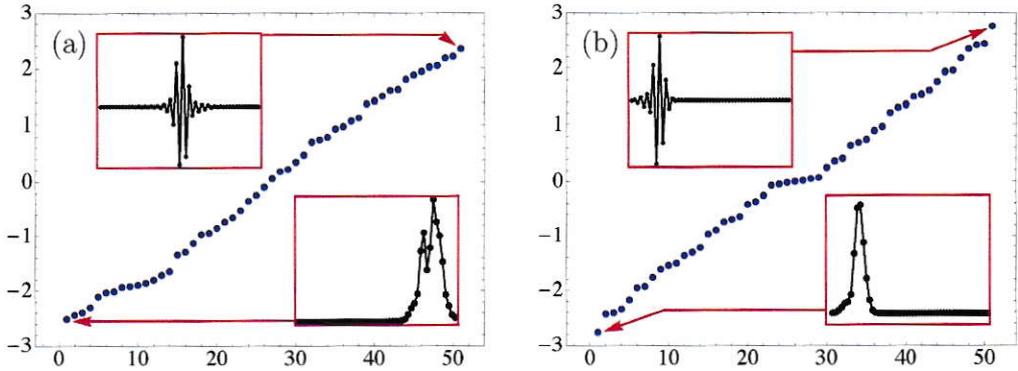


Figura 5.2: Bandas lineales de dos sistemas con (a) desorden diagonal, y (b) desorden no diagonal, respectivamente, para $W = 1$. Los insertos muestran los modos normales en los bordes de las bandas. Notese que en (b) el modo más alto es la versión *staggered* del inferior.

la ecuación (5.1) se traduce en la siguiente ecuación de autovalores

$$\lambda U_n = \epsilon_n U_n + \kappa_n U_{n+1} + \kappa_{n-1} U_{n-1}. \quad (5.5)$$

Los autovectores normalizados $U_{\nu,n}$ de esta ecuación son los MNs con sus correspondientes frecuencias λ_ν . En ausencia de no linealidad, la localización de Anderson ocurre para ambos tipos de desorden. Así, incrementando el valor de W , los autoestados del sistema se vuelven más localizados, mientras que la banda lineal (esto es, el espectro de frecuencias de los MNs) se ensancha hasta $4 + W$ aproximadamente [81] (ver fig. 5.2). Un hecho interesante es que para desorden no diagonal el ensanchamiento de la banda es simétrico, al contrario de lo que ocurre para desorden diagonal. La simetría del primer caso está relacionada con una correspondencia existente entre cada MN *staggered* en la parte superior del espectro y su versión *unstaggered* en la parte inferior, que se da sólo para desorden no diagonal. Comprobamos esto considerando nuevamente una solución estacionaria $u_n(z) = u_n e^{-i\lambda t}$ de la ec. (5.1) (para $q = 0$), y sustituyendo λ y u_n con $-\lambda$ y $(-1)^n u_n$, respectivamente.

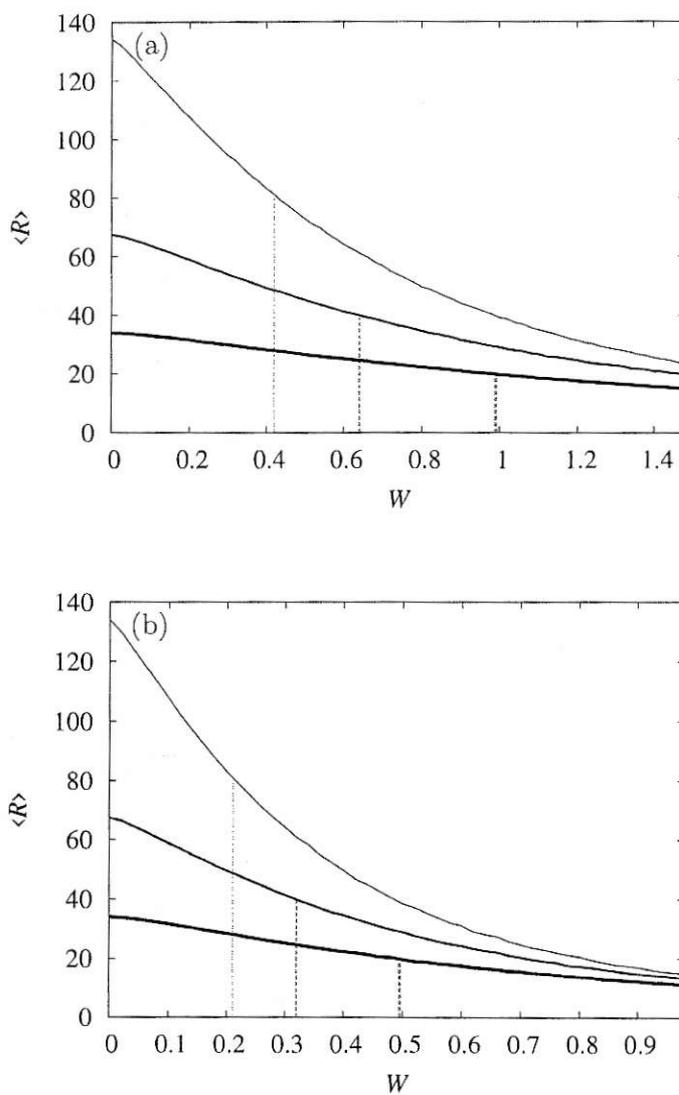


Figura 5.3: Número de participación promedio de todos los MNs del sistema en función del grado de desorden para cadenas de distinto tamaño. (a) Desorden diagonal. (b) Desorden no diagonal. Las curvas desde la más gruesa a la más delgada corresponden a 50, 100 y 200 sitios respectivamente.

Este procedimiento lleva a

$$-\lambda u_n = \epsilon_n u_n - \kappa_{n-1} u_{n-1} - \kappa_n u_{n+1}. \quad (5.6)$$

Entonces, vemos que la simetría $\lambda \rightarrow -\lambda$, $u_n \rightarrow (-1)^n u_n$ es válida sólo si $\epsilon_n \equiv 0$, es decir, para desorden no diagonal. Esto es ilustrado en los insertos de la fig. 5.2 donde mostramos los MNs correspondientes a los bordes de cada banda (los modos más extendidos están alrededor del centro del espectro) para una configuración al azar con grado de desorden $W = 2$. Además presentamos una comparación entre las bandas lineales para desorden no diagonal y diagonal, mostrando explícitamente la simetría y la carencia de ella para uno y otro caso.

A continuación, a modo de análisis estadístico, calculamos numéricamente el número de participación promedio $\langle R \rangle$ de todos los MNs para 100 realizaciones por cada valor de W , y para cadenas de distintos tamaños. En un sistema ordenado ($W = 0$) de M sitios, cada MN está extendido sobre el arreglo, y puede mostrarse que su número de participación es igual a $2(M + 1)/3$. En la ref. [82] se encontró un decaimiento exponencial de $\langle R \rangle$ con W para cadenas muy grandes con desorden diagonal; de acuerdo a nuestros cálculos, obtenemos que $\langle R \rangle$ decrece más rápido cuando el desorden está dado en los coeficientes de acoplamiento que en el caso de desorden diagonal: el efecto de la localización de Anderson en los MNs es más fuerte con desorden no diagonal (fig. 5.3). No obstante, las curvas $\langle R \rangle$ vs W son similares en forma para ambos tipos de desorden, pudiendo ser *mapeadas* las unas en las otras al escalar W por un factor 2. Además, notamos que la tasa de decaimiento varía con el tamaño del arreglo N , como se aprecia al comparar las figs. 5.3 (a) y (b). Ahí indicamos el grado de desorden W_c correspondiente a $\langle R \rangle_c = 0.4M$, que definimos como valor crítico para considerar que un pulso está deslocalizado o extendido². Esto puede usar-

²Esta elección ya ha sido hecha en [81]

se para definir dos regímenes: para desorden bajo W_c , los MNs son — en promedio — extendidos sobre toda la cadena; para W sobre W_c , la mayoría de los MNs están localizados (al menos, su número de participación es menor que $0.4M$). Observamos que W_c decrece al aumentar N (ver líneas verticales en la fig. 5.3), lo que implica que el decaimiento de $\langle R \rangle$ es más abrupto para una cadena más grande (para un sistema infinito, W_c tiende a 0, lo que implica localización de Anderson incluso para bajo desorden).

5.3. Difusión lineal.

En segundo lugar, estudiamos la evolución de perfiles inicialmente localizados en el sistema lineal. Integramos numéricamente la ecuación (5.1) para una realización con un cierto grado de desorden W (consideramos desorden diagonal y no diagonal por separado), tomando como condición inicial una excitación de un solo sitio

$$u_n(0) = \delta_{n,n_0}, \quad (5.7)$$

donde n_0 es un sitio cerca del centro de la cadena. Cuando el paquete de ondas ha evolucionado hasta $t = t_f = M/4$, calculamos el número de participación del perfil final³. Luego de repetir este procedimiento para muchas realizaciones, cambiamos el valor de W hasta cubrir el rango $0 < W < 2$, obteniendo así la dependencia del número de participación final promedio en el grado de desorden. Nuestros resultados se muestran en la fig. 5.4. Aparece entonces una diferencia clara entre los dos tipos de desorden considerados: para desorden diagonal bajo, el número de participación se incrementa notablemente hasta un valor máximo, desde donde se observa el decaimiento esperado para valores más grandes de W . Esto ya ha sido reportado en [81],

³El valor $t_f = M/4$, también utilizado en [81], corresponde al instante en que los lóbulos laterales de un pulso $u_n(0) = \delta_{n,n_0}$ alcanzan los bordes de una cadena ordenada.

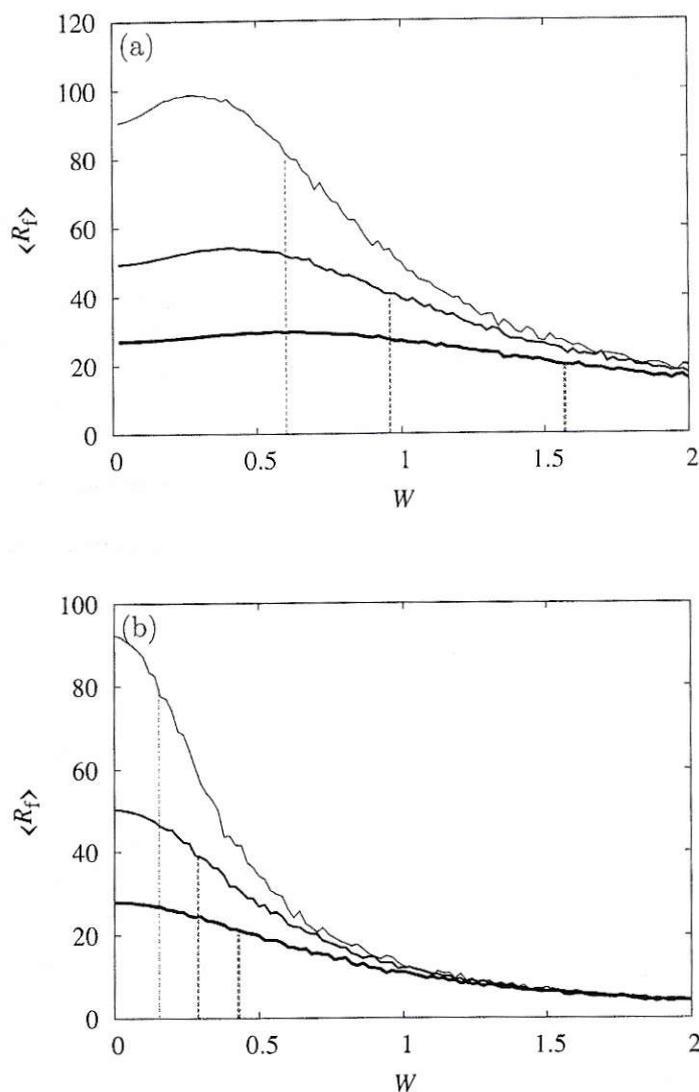


Figura 5.4: Promedio (sobre 100 realizaciones) del número de participación final de un pulso inicialmente localizado que se propaga hasta alcanzar los bordes del arreglo. (a) Desorden diagonal. (b) Desorden no diagonal. Las curvas desde la más gruesa a la más delgada corresponden a 50, 100 y 200 sitios, respectivamente. Las líneas verticales grises marcan el grado de desorden para el cual el número de participación promedio es igual a $0.4M$.

donde se da una explicación del fenómeno en base al número de MNs que participan en la difusión del perfil δ_{n,n_0} , y que, dada la simetría par de éste, correspondería exactamente a la mitad de los M modos disponibles. A medida que el desorden se incrementa, los MNs dejan de tener una simetría definida, por lo que una mayor cantidad de ellos están involucrados en la evolución lineal de la excitación inicial. No obstante, otros efectos deben ser tomados en consideración al extender este argumento a sistemas con desorden no diagonal, ya que en este caso no se observa ningún incremento del número de participación, sino que éste decrece de forma monótona al aumentar el grado de desorden [fig. 5.4 (b)].

Aquí ofrecemos una explicación cualitativa de la diferencia observada para el régimen de bajo desorden, esto es, cuando la localización de Anderson es poco notoria [83]. Si construimos un sistema con desorden diagonal, en cualquier posición n podemos tener energía de sitio cerca de $-W/2$ o de $W/2$ con igual probabilidad. Muy posiblemente, el paquete de ondas tenderá a localizarse alrededor de sitios con estos valores extremos⁴ como si se tratara de impurezas locales, incrementando así el número de participación. No obstante, el paquete de ondas aún puede difundir desde esos sitios, ya a la izquierda, ya a la derecha, es decir, no hay una dirección privilegiada para la difusión, ya que los coeficientes de acoplamiento permanecen iguales. Así, podemos decir que el esparcimiento del pulso sobre la cadena no se ve afectado por el desorden diagonal débil, permitiendo incluso que el número de participación aumente. Por el contrario, un sistema con desorden no diagonal presenta coeficientes de acoplamiento cerca de $1 - W/2$ y $1 + W/2$ con la misma probabilidad (lo que puede generar impurezas locales), pero estos valores tienen distinto efecto: los más bajos obstaculizan la propagación del paquete de ondas (ya que atenúan el acoplamiento

⁴sólo si la energía de sitio en posiciones contiguas es menor en magnitud

entre dos sitios vecinos), mientras que los más altos contribuyen a ella. Así, para cada sitio aparece una dirección privilegiada para la difusión. Dado que la excitación considerada se origina en el centro del arreglo, lo anterior implica que se extenderá en una región alrededor del centro, incluso para bajo desorden, privilegiando la dirección de mayor acoplamiento: la extensión del paquete de ondas (y por tanto su número de participación) se ve limitado en su crecimiento, y sólo decrece.

Tal como hicimos en el análisis de los MNs, indicamos en la fig. 5.4 el valor crítico W_c que corresponde a $R = 0.4M$. Nuevamente vemos que W_c disminuye al aumentar el número de sitios, confirmando que el decaimiento del número de participación causado por el desorden se acentúa cuanto más grande es la red.

5.4. Difusión no lineal. q fijo.

Cuando la densidad atómica es suficiente para inducir efectos no lineales en el BEC, la energía se ve modificada a causa del potencial de interacción. Esto produce una renormalización en las frecuencias de excitación de los MNs [81, 82], llevando a una interacción entre ellos. Formalmente, esto se expresa al expandir un paquete de ondas $u_n(t)$ en el espacio de los modos normales $U_{\nu,n}$ según

$$u_n(t) = \sum_{\nu} \phi_{\nu}(t) U_{\nu,n}, \quad (5.8)$$

donde $\phi_{\nu}(t)$ son los coeficientes tiempo-dependientes de la expansión (en el caso lineal serían proporcionales a $e^{i\lambda_{\nu}t}$) Sustituyendo en (5.1) obtenemos

$$\begin{aligned} -i \sum_{\nu} \dot{\phi}_{\nu} U_{\nu,n} = & \epsilon_n \sum_{\nu} \phi_{\nu} U_{\nu,n} + \kappa_{n-1} \sum_{\nu} \phi_{\nu} U_{\nu,n-1} + \kappa_n \sum_{\nu} \phi_{\nu} U_{\nu,n+1} \\ & + q \sum_{\nu_1, \nu_2, \nu_3} \phi_{\nu_1}^* \phi_{\nu_2} \phi_{\nu_3} U_{\nu_1,n} U_{\nu_2,n} U_{\nu_3,n}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Ahora aplicamos el proyector $\sum_n U_{\bar{\nu},n}$ a esta ecuación. El miembro izquierdo queda

$$-i \sum_{n,\nu} \dot{\phi}_\nu U_{\nu,n} U_{\bar{\nu},n} = -i \sum_\nu \dot{\phi}_\nu \sum_n U_{\nu,n} U_{\bar{\nu},n} = -i \sum_\nu \dot{\phi}_\nu \delta_{\nu,\bar{\nu}} = -i \dot{\phi}_{\bar{\nu}}. \quad (5.10)$$

Los términos lineales en el miembro derecho de (5.9) son proyectados como sigue:

$$\begin{aligned} \sum_n U_{\bar{\nu},n} \epsilon_n \sum_\nu \phi_\nu U_{\nu,n} + \sum_n U_{\bar{\nu},n} \kappa_{n-1} \sum_\nu \phi_\nu U_{\nu,n-1} + \sum_n U_{\bar{\nu},n} \kappa_n \sum_\nu \phi_\nu U_{\nu,n+1} \\ = \sum_\nu \phi_\nu \sum_n U_{\bar{\nu},n} [\epsilon_n U_{\nu,n} + \kappa_{n-1} U_{\nu,n-1} + \kappa_n U_{\nu,n+1}] \\ = \sum_\nu \phi_\nu \sum_n U_{\bar{\nu},n} \lambda_\nu U_{\nu,n} \\ = \sum_\nu \lambda_\nu \phi_\nu \delta_{\bar{\nu},\nu} \\ = \lambda_{\bar{\nu}} \phi_{\bar{\nu}}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Aquí se usó el hecho de que los $U_{\nu,n}$ son solución de la parte lineal de (5.1), es decir, que satisfacen la ec. (5.5). Finalmente, el término no lineal en (5.9) lleva a la proyección siguiente:

$$q \sum_n U_{\nu,n} \sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3} \phi_{\nu_1}^* \phi_{\nu_2} \phi_{\nu_3} U_{\nu_1,n} U_{\nu_2,n} U_{\nu_3,n} = q \sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3} I_{\nu,\nu_1,\nu_2,\nu_3} \phi_{\nu_1}^* \phi_{\nu_2} \phi_{\nu_3}, \quad (5.12a)$$

con las integrales de traslape definidas como

$$I_{\nu,\nu_1,\nu_2,\nu_3} = \sum_n U_{\nu,n} U_{\nu_1,n} U_{\nu_2,n} U_{\nu_3,n}. \quad (5.12b)$$

Las expresiones (5.10-5.12) definen la ecuación de evolución para la amplitud $\phi_\nu(t)$:

$$-i \dot{\phi}_{\bar{\nu}} = \lambda_{\bar{\nu}} \phi_{\bar{\nu}} + q \sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3} I_{\nu,\nu_1,\nu_2,\nu_3} \phi_{\nu_1}^* \phi_{\nu_2} \phi_{\nu_3}. \quad (5.13)$$

En todas estas expresiones, $U_{\nu,n}$ es el ν -ésimo modo normal (sec. 5.2). En relación a la dinámica del sistema, la ecuación anterior implica que, en el régimen no lineal, un paquete de ondas no puede ser descompuesto en modos específicos con frecuencias

fijas que se propagan independientemente, ya que la interacción puede llevar a que otros modos sean excitados: las resonancias entre MNs llevan a una dinámica caótica dentro del paquete de ondas, cuya propagación pasa a ser incoherente [82]. A su vez, esto puede producir su deslocalización a medida que evoluciona. (Evidentemente, un efecto tal sólo es posible cuando la no linealidad no tiene la magnitud necesaria para producir autoatrapamiento.)

A fin de comprobar este efecto, propagamos una excitación inicialmente localizada, tal como en la sección anterior, hasta un tiempo t_f en que el paquete de ondas aún no alcanza los bordes del arreglo⁵. Calculamos el número de participación final y promediamos sobre 100 realizaciones, para un rango de desorden $0 < W < 2$ y de no linealidad $0 < q < 10$. Nuestros resultados se muestran en la figura 5.5. Un hecho sorprendente es que la no linealidad parece favorecer un incremento del número de participación final incluso en ausencia de desorden, generándose un *peak* cerca de $q = 3$. Al observar los perfiles finales en torno a este punto, podemos ver que el crecimiento del número de participación se debe a una distribución más homogénea de la intensidad en el perfil final y no a un incremento en su ancho⁶. Asimismo, surgen diferencias radicales entre ambos tipos de desorden: En concordancia con lo hallado al estudiar la difusión lineal, el desorden sólo favorece la deslocalización para desorden diagonal; a medida que aumentamos q , la *cima* en el número de participación se desplaza hacia valores más bajos de desorden. Luego, es claro que el punto de mayor extensión se encuentra para alguna combinación de desorden y no linealidad. Para desorden no diagonal, el decaimiento monótono del número de participación con el desorden persiste para valores no nulos de q [ver fig. 5.5 (b)].

⁵Es decir, menor que $M/4$, ver nota 5.3.

⁶Esta es una de las razones que nos lleva a preferir el número de participación como parámetro cuantificador de la localización (o extensión) de un pulso, frente a otros parámetros usados en la literatura, como el segundo momento, más apropiado para arreglos infinitos.

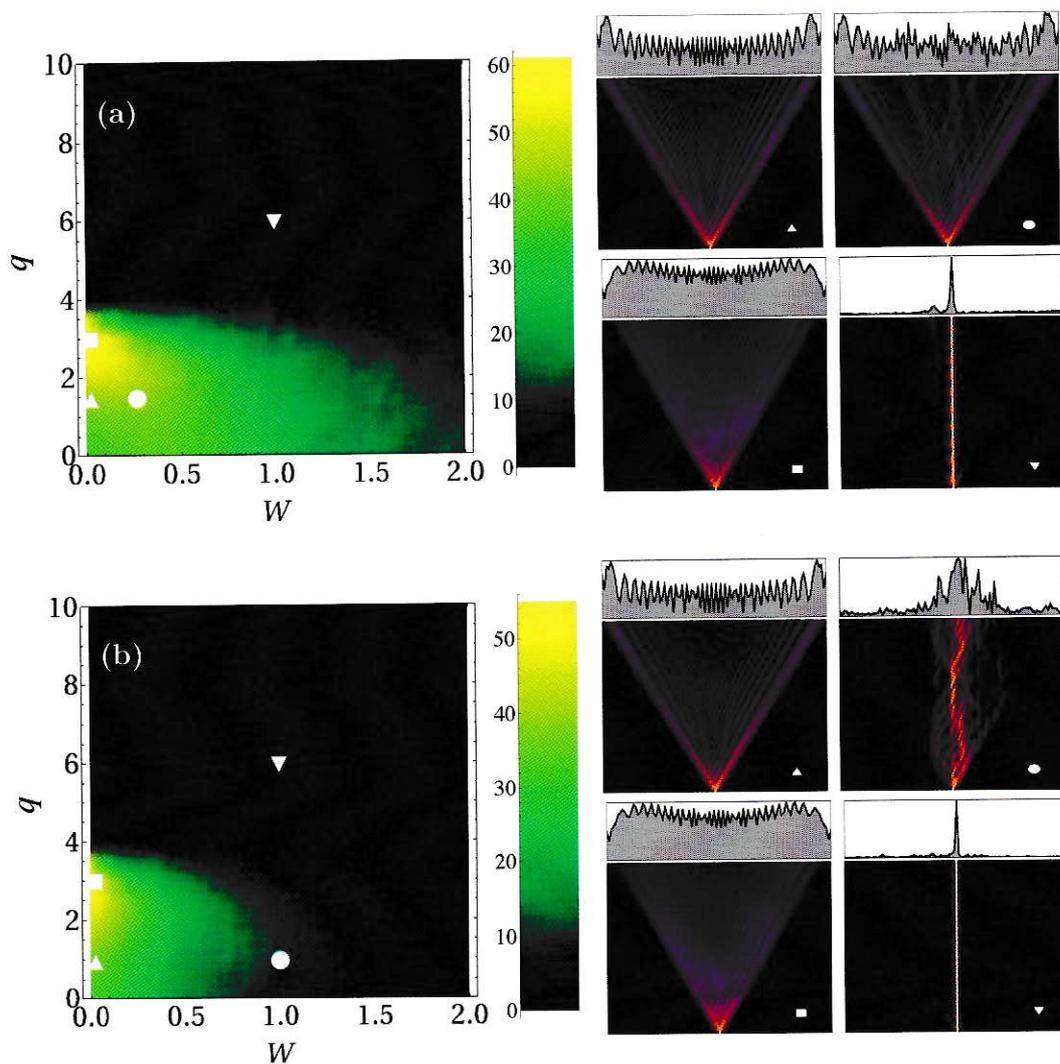


Figura 5.5: Número de participación (promediado sobre 100 realizaciones) de un paquete de ondas inicialmente localizado en el centro del arreglo y propagado hasta $z = M/4$ con $N = 100$ sitios. (a) Desorden diagonal. (b) Desorden no diagonal. A la derecha se muestran algunos ejemplos de la evolución del paquete de ondas y el perfil final, correspondientes a los puntos indicados en el gráfico.

5.5. Difusión no lineal. q variable.

Cuando la interacción de contacto en un BEC (o la respuesta no lineal de un medio óptico) no es fija sino que, cambia en el tiempo, es posible que un paquete de ondas evolucionando en el sistema interactúe con distintos MNs, es decir, que haya resonancia con alguna frecuencia del espectro lineal⁷. Luego, con el fin de registrar el cambio en la frecuencia que sufre el paquete de ondas, usamos la *frecuencia efectiva* λ_{ef} definida al insertar el *ansatz* $u_n(t) = A_n \exp(-i\lambda_{\text{ef}}t)$ en la ec. (5.1). Multiplicando por u_n^* y sumando sobre n podemos despejar

$$\lambda_{\text{ef}} = -\frac{1}{N} \sum_n [\epsilon_n |u_n|^2 + \kappa_n u_{n+1} u_n^* + \kappa_{n-1} u_{n-1} u_n^* + q(z) |u_n|^4], \quad (5.14)$$

donde hemos determinado una variación lineal de q con z [81]:

$$q(z) = cz. \quad (5.15)$$

El factor c queda definida como la tasa de crecimiento o *velocidad no lineal*, esto es, la razón de cambio de la interacción de contacto. Físicamente, este incremento lineal puede ser logrado mediante las resonancias de Feschbach (sec. 3.2) con un campo magnético variable, como ha sido propuesto en las refs. [81, 84, 85].

Evidentemente, un valor de c muy grande, implica una variación rápida de la frecuencia efectiva, lo que hace que ésta salga de la banda lineal y el pulso se mantenga localizado sin la posibilidad de interactuar con los MNs. Por el contrario, una velocidad baja permite una disminución paulatina de la frecuencia efectiva, aumentando la posibilidad de interacción resonante con los MNs de la banda, lo que favorece la deslocalización. Esto se ilustra en la fig. 5.6. Nuestro propósito es determinar la velocidad no lineal crítica c_c bajo la cual un paquete de ondas inicialmente localizado

⁷Otros factores como la posición espacial de los MNs deben ser tenidos en cuenta para evaluar la probabilidad real de que ocurra resonancia, ya que debe existir un *overlap* espacial no nulo entre el paquete de ondas y el modo con el que este interactúa.

se extiende sobre la cadena (evidentemente, para un valor alto, el autoatrapamiento predomina sobre la deslocalización producida por la interacción entre MNs). Para un cierto grado de desorden, tomamos un valor inicial de c e integramos la ec. (5.1) con la misma condición inicial localizada de la sección 5.3 hasta que la frecuencia efectiva del paquete de ondas alcanza el fondo del espectro lineal (bajo esta frecuencia, el paquete de ondas no puede interactuar con ningún otro MN, y en caso de estar localizado, permanecerá así debido a la creciente no linealidad). Luego, evaluamos el número de participación R_f del perfil final. Si $R_f < 0.4$, definimos que el pulso está localizado, por lo que reducimos c en una cierta cantidad Δc y repetimos la simulación con la misma configuración de coeficientes de acoplamiento y energías de

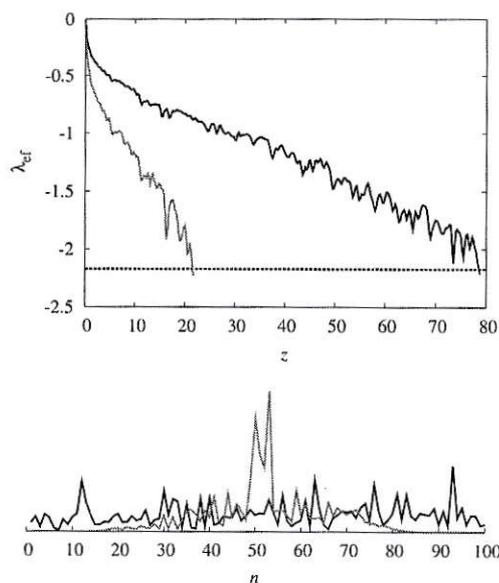


Figura 5.6: Arriba: Evolución de la frecuencia efectiva para una velocidad no lineal baja ($c = 1$, curva negra) y alta ($c = 2.5$, curva gris). La línea punteada gris marca el borde inferior de la banda lineal. Abajo: Los correspondientes perfiles finales. Podemos ver cómo una velocidad más baja permite que el paquete de ondas se deslocalice antes de que su frecuencia efectiva salga de la banda lineal. En ambos casos, el grado de desorden es $W = 0.8$.

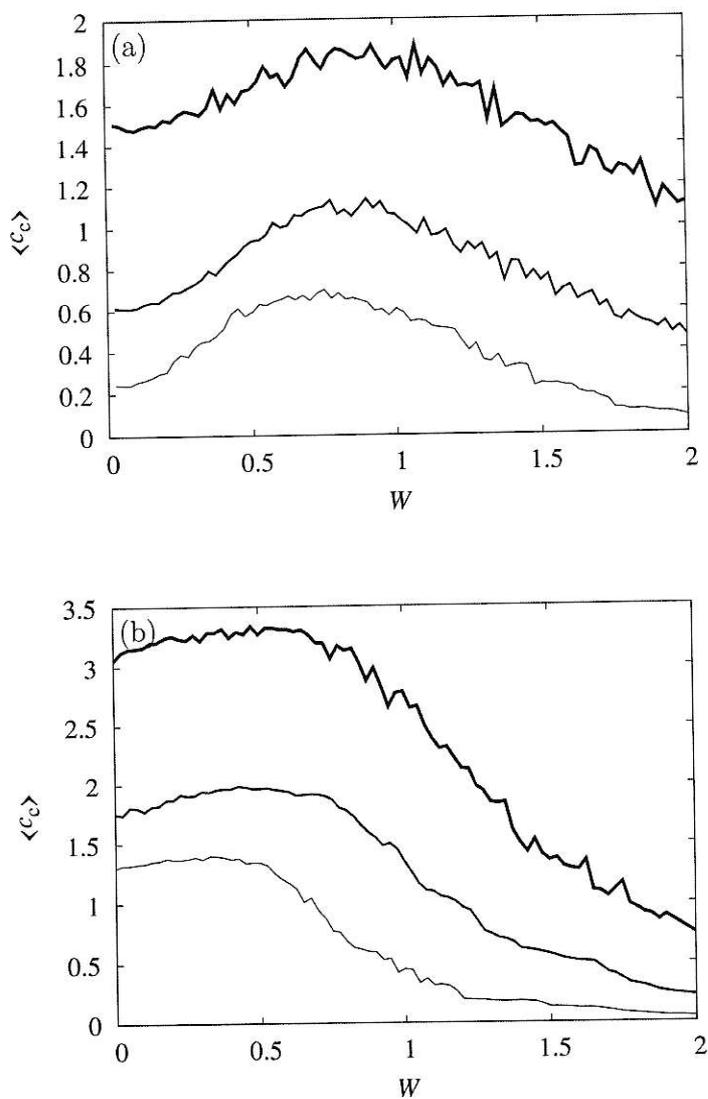


Figura 5.7: Velocidad no líneal crítica versus grado de desorden para (a) desorden diagonal y (b) desorden no diagonal. Las curvas desde la más gruesa a la más delgada corresponden a 50, 100 y 200 sitios respectivamente.

sitio. Si ahora el pulso está extendido, esto es $R_f > 0.4$, aumentamos c en $\Delta c/2$; si no, continuamos reduciendo c . La continuación de este procedimiento nos permite acotar el valor crítico en que se produce la transición hasta la precisión deseada. Para un rango de desorden $0 < W < 2$, repetimos este procedimiento cien veces, obteniendo un valor promedio \bar{c} . Nuestros resultados se muestran en la fig. 5.7. En un primer acercamiento, llama la atención una cierta correspondencia cualitativa entre las curvas encontradas para la difusión lineal en la sección 5.3 y las obtenidas ahora: para desorden diagonal, existe claramente un máximo de la velocidad crítica que permite deslocalizar un pulso. Una lectura de este fenómeno puede darse considerando el regimen de lineal, en que, como se señaló, el bajo desorden favorece por sí mismo la extensión del paquete de ondas: a medida que se incrementa W , el perfil final tiende a ser más extendido, por lo que se requiere una velocidad mayor que saque rápidamente la frecuencia efectiva de la banda lineal y lleve el sistema al regimen de autoenfoco. En este caso, la no linealidad ayuda a contener la difusión, mientras que para desorden alto contribuye a aumentar las interacciones con otros modos, y así deslocalizar el paquete de ondas. Para desorden no diagonal, en tanto, si bien aparece un incremento en la velocidad crítica, éste es menor que para el primer caso, confirmando así que este tipo de desorden “castiga” más fuertemente la extensión de la onda sobre el sistema, como se puede intuir a partir de nuestros resultados del sistema lineal. Asimismo, el *peak* en este caso aparece para un valor mucho más bajo, y queda limitado por los valores críticos de desorden encontrados anteriormente.

En un nivel más básico, destacamos el hecho de que es posible encontrar la velocidad crítica que permite deslocalizar un paquete de ondas en presencia de desorden no diagonal. Esto constituye un resultado importante en sí mismo, que viene a complementar lo encontrado en [81] para desorden diagonal.

5.6. Conclusiones.

Hemos estudiado un sistema discreto no lineal desordenado, usando como modelo una generalización de la ecuación DNLS en que tanto las energías de sitio como los coeficientes de acoplamiento pueden variar aleatoriamente en cada posición de la cadena, dando lugar a desorden diagonal y no diagonal, respectivamente. Ambos casos han sido analizados a través del efecto que tienen en la extensión espacial de los modos normales (MNs) del sistema, y en la localización de paquetes de onda que se propagan en éste. El parámetro que utilizamos para cuantificar la extensión de un perfil es el número de participación R [ec. (5.4)], que ofrece una estimación de cuántos sitios contribuyen efectivamente (participan) de la distribución de la función de onda sobre la cadena. En general, nuestro método consiste en considerar muchas realizaciones (distribuciones aleatorias para los parámetros que introducen desorden) y promediar las cantidades relevantes para distintos grados o *fuerzas* de desorden.

En primer lugar, estudiamos el cambio en el espectro lineal del sistema (frecuencias de los MNs). Observamos que para un grado de desorden W , el espectro se ensancha hasta $4+W$, existiendo una diferencia en la simetría de la banda lineal entre sistemas con desorden diagonal y no diagonal. Después, evaluamos el número de participación promedio de todos los MNs de la cadena lineal, para los dos tipos de desorden en un cierto rango. Si bien en ambos casos observamos localización de Anderson de los modos, este efecto es más fuerte para desorden no diagonal, manifestándose en un decaimiento más abrupto del número de participación promedio al incrementarse el grado de desorden. Las diferencias entre ambos tipos de desorden son aun más claras al estudiar la propagación de un paquete de ondas inicialmente localizado sobre la cadena lineal. Evaluando el número de participación del perfil en un instante

t_f y promediando sobre muchas realizaciones para distintos grados de desorden, observamos que hay un incremento en el valor promedio de R para bajo desorden diagonal, que no se observa para el caso de desorden no diagonal. Esto significa que la distribución de la energía sobre la cadena se ve, al principio, favorecida por el desorden, antes de pasar al régimen donde prevalece la localización de Anderson. Con respecto a por qué esto sucede exclusivamente para desorden diagonal, ofrecemos una explicación cualitativa que tiene en cuenta el efecto de variar aleatoriamente las energías de sitio y las constantes de acoplamiento.

Posteriormente, estudiamos la combinación de desorden y no linealidad, calculando el número de participación final después de propagar un perfil localizado (de modo semejante al caso lineal). Observamos que, incluso en ausencia de desorden, un grado de no linealidad contribuye a la deslocalización del paquete de ondas, a través de la renormalización de las frecuencias lineales, que lleva asociada la interacción resonante del paquete con los MNs. Esto se traduce en una distribución más homogénea de las amplitudes de la onda en los sitios de la cadena. La diferencia observada entre ambos tipos de desorden para el caso lineal se mantiene en el caso no lineal: el desorden sólo favorece la deslocalización para desorden diagonal, desplazándose el *peak* del número de participación hacia valores más bajos de desorden a medida que incrementamos la no linealidad.

Finalmente, consideramos el caso en que la no linealidad no es constante, sino que se incrementa linealmente en el tiempo, a una razón c . A través de la introducción de la frecuencia efectiva, podemos estimar cuándo un paquete de ondas deja de interactuar con los modos lineales. Luego, buscamos el valor crítico de c sobre (bajo) el cual un paquete de ondas se mantendrá localizado (se extenderá sobre todo el sistema). Los cálculos numéricos implementados nos permiten encontrar este valor

crítico para cualquier grado de desorden diagonal y no diagonal, mostrando una vez más diferencias entre ambos casos, que pueden asociarse a los resultados obtenidos en el estudio del sistema lineal. Especialmente interesante es el hecho de que el efecto del desorden en la difusión lineal determina el rol que debe jugar la no linealidad (y que puede ser controlado a través de la velocidad no lineal c) en los regímenes de bajo y alto desorden. Cuando se tiene desorden diagonal bajo, se requiere un valor crítico de c alto, a fin de evitar la resonancia con los MNs y *frenar* la deslocalización del pulso. (Esto también se cumple para desorden no diagonal, pero en menor grado.) Para alto desorden, en tanto, se tiene un valor mucho más bajo de c crítico, bajo el cual se permite que la frecuencia efectiva recorra lentamente la banda lineal, aumentando las posibilidades de interacción con los modos normales, lo que favorece la deslocalización. En nuestro análisis consideramos también sistemas de distintos tamaños, concluyendo que el decaimiento en el número de participación y en la velocidad crítica (sea o no precedido de un incremento previo) ocurre más rápido cuanto mayor es la cadena.

Conclusiones generales

Hemos llevado a cabo un estudio exhaustivo de modelos discretos no lineales derivados de la ecuación discreta no lineal de Schroedinger, que se aplican a la descripción de condensados de Bose-Einstein. Tanto los condensados dipolares como el desorden son objeto de estudios que aún están en desarrollo dentro de la comunidad científica mundial, por lo que no podemos afirmar que nuestro trabajo está terminado. Al contrario, con esta tesis esperamos haber logrado (1) realizar una revisión profunda de los elementos teóricos fundamentales que definen los modelos utilizados, (2) presentar y aplicar un método adecuado para el estudio de los sistemas tratados, y (3) destacar la relevancia y novedad asociada a nuestro análisis.

La idea de abordar el estudio de condensados dipolares a través de un modelo tipo DNLS surgió en la primera etapa de nuestra investigación, gracias a la sugerencia del doctor Fatkhulla Abdullaev⁸, investigador de amplia experiencia en la dinámica de solitones en diversos medios. El trabajo conjunto que nuestro grupo realizó con él, definió en gran medida la línea que siguió nuestro estudio, y tuvo como fruto una publicación [58] que recoge parte de los resultados presentados en el capítulo 4 de esta tesis. La relevancia y originalidad de éstos, nos llevó a exponer nuestro trabajo en la escuela de Verano “Summer School on Quantum Matter: Foundations and New Trends” realizada en Granada durante septiembre de 2011. Una explicación

⁸Physical-Technical Institute, Uzbek Academy of Sciences, Tashkent, Uzbekistan; Centro de Física Teórica e Computacional, Universidade de Lisboa, Lisboa, Portugal.

detallada de los métodos numéricos empleados en nuestro análisis — en particular el método del *constraint*, será incluida en el libro *Numerical Simulations*⁹, que se encuentra en proceso de revisión y edición. Actualmente, dentro de nuestro grupo, estamos trabajando en la extensión de nuestro modelo a sistemas bidimensionales, donde ya hemos podido observar que la interacción dipolar tiene efectos interesantes e inesperados, como la disminución del umbral de norma necesario para la existencia de soluciones localizadas, movilidad de solitones discretos (poco común en sistemas bidimensionales) y regiones de estabilidad simultánea de dos soluciones fundamentales localizadas.

Por otra parte, avanzar en la comprensión del complejo comportamiento exhibido por sistemas discretos no lineales desordenados, ha sido una de las principales metas de nuestro grupo desde hace ya varios años. Es por eso que, una vez definido el enfoque que daríamos a nuestro trabajo, estos sistemas constituyeron nuestro primer objeto de estudio. En la conferencia de la Sociedad Chilena de Física realizada en Pucón el año 2010, presentamos un esbozo del análisis que ahora forma parte de esta tesis, junto a algunos resultados preliminares que ilustraban nuestros puntos principales: (i) el desorden y la no linealidad no solo favorecen la localización, sino que en cierto rango incluso la contrarrestan; y (ii) la fenomenología varía según se considere desorden diagonal o no diagonal. Nuevamente, la colaboración con investigadores de otros grupos — en este caso con el eximio experimentalista Alexander Zsameit¹⁰ — nos permitió dar un mayor alcance a nuestro trabajo, y contar con la realización experimental de sistemas desordenados no lineales, en arreglos de guías de ondas. Así, algunos de nuestros resultados, en particular la mejora en la difusión de un pulso

⁹Academy Publish, 2012.

¹⁰Institute of Applied Physics, Friedrich-Schiller-University, Jena, Alemania.

en presencia de bajo desorden (ver capítulo 5), han podido ser comprobados en el contexto de la óptica no lineal [83].

Esperamos que este trabajo de pie a futuros desarrollos que completen y profundicen el conocimiento actual sobre la fenomenología no lineal en sistemas discretos.

Apéndice A

Número de participación de los modos normales de una cadena ordenada.

A continuación mostraremos que los modos normales (MNs) de una cadena ordenada lineal, descrita por la ecuación

$$-i \frac{du_n(z)}{dz} = u_{n-1}(z) + u_{n+1}(z), \quad (\text{A.1})$$

tienen número de participación igual a $2(M+1)/3$, donde M es el tamaño del arreglo (número de sitios).

Los modos estacionarios $u_n(z) = u_n e^{i\omega z}$ satisfacen la ecuación lineal

$$\omega u_n = u_{n-1} + u_{n+1}, \quad (\text{A.2})$$

por lo que tienen la forma general (omitimos normalización porque calculamos la norma explícitamente más abajo)

$$u_n = \text{sen}(kn). \quad (\text{A.3})$$

Dado que trabajamos con condiciones de borde fijas, la ecuación para $n = 1$ tiene la forma $\omega u_1 = u_2$, o bien

$$\omega \text{sen}(k) = \text{sen}(2k) = 2 \text{sen } k \cos k,$$

de donde obtenemos la relación de dispersión

$$\omega = 2 \cos k. \quad (\text{A.4})$$

En tanto, para $n = M$ se cumple $\omega u_M = u_{M-1}$:

$$\omega \text{sen}(Mk) = \text{sen}([M-1]k) = \text{sen}(Mk) \cos k - \cos(Mk) \text{sen } k,$$

o bien

$$\text{sen}(Mk) \cos k + \cos(Mk) \text{sen } k = \text{sen}([M+1]k) = 0,$$

de donde se sigue que k toma los valores discretos

$$k_\nu = \frac{\nu\pi}{M+1}. \quad (\text{A.5})$$

Para nuestro desarrollo necesitaremos primero demostrar la igualdad

$$\sum_n^M \cos(2n\alpha) = \frac{\cos([M+1]\alpha) \operatorname{sen}(M\alpha)}{2 \operatorname{sen} \alpha}. \quad (\text{A.6})$$

Para esto, notamos que con cualquier n se cumple

$$\operatorname{sen} \alpha \cos(2n\alpha) = \frac{1}{2} \{ \operatorname{sen}([2n+1]\alpha) - \operatorname{sen}([2n-1]\alpha) \}. \quad (\text{A.7})$$

Luego, el lado izquierdo de (A.6) puede expresarse como una suma telescópica:

$$\begin{aligned} \sum_n^M \cos(2n\alpha) &= \cos 2\alpha + \cos 4\alpha + \cos 6\alpha + \cdots + \cos 2M\alpha \\ &= \frac{1}{2 \operatorname{sen} \alpha} \{ (\operatorname{sen} 3\alpha - \operatorname{sen} \alpha) + (\operatorname{sen} 5\alpha - \operatorname{sen} 3\alpha) + \cdots \\ &\quad + (\operatorname{sen}[(2M+1)\alpha] - \operatorname{sen}[(2M-1)\alpha]) \}, \end{aligned}$$

de donde se sigue directamente (A.6).

Ahora queremos mostrar que el número de participación

$$R = \frac{(\sum |u_n|^2)^2}{\sum |u_n|^4}$$

de los MNs es igual a $\frac{2}{3}(M+1)$. En primer lugar calculamos la sumatoria en el numerador de R (norma):

$$\begin{aligned} \sum_n^M u_n^2 &= \sum_n^M \operatorname{sen}^2(k_\nu n) \\ &= \sum_n^M \frac{1 - \cos(2k_\nu n)}{2} \\ &= \frac{M}{2} - \frac{1}{2} \sum_n^M \cos(2k_\nu n) \\ &= \frac{M}{2} - \frac{\cos([M+1]k_\nu) \operatorname{sen}(Mk_\nu)}{2 \operatorname{sen}(k_\nu)}, \end{aligned}$$

donde hemos usado el resultado (A.6).

Ahora bien, vemos que para cualquier $k_\nu = \nu\pi/(M+1)$, el segundo término de la expresión anterior es igual a

$$-\underbrace{\cos(\nu\pi)}_{(-1)^\nu} \underbrace{\frac{\text{sen}(\nu M\pi/[M+1])}{\text{sen}(\nu\pi/[M+1])}}_{(-1)^{\nu+1}} = +1/2.$$

. Por lo tanto, concluimos que

$$\sum_n^M u_n^2 = \frac{1}{2}(M+1) \quad (\text{A.8})$$

En segundo lugar, calculamos

$$\begin{aligned} \sum_n^M u_n^4 &= \sum_n^M \text{sen}^4(k_\nu n) \\ &= \sum_n^M \left(\frac{1 - \cos(2k_\nu n)}{2} \right)^2 \\ &= \frac{M}{4} - \frac{1}{2} \sum_n^M \cos(2k_\nu n) + \frac{1}{4} \sum_n^M \cos^2(2k_\nu n) \\ &= \frac{M}{2} - \frac{1}{2} \sum_n^M \cos(2k_\nu n) - \frac{1}{4} \sum_n^M \text{sen}^2(2k_\nu n) \\ &= \frac{3M}{8} - \frac{\cos([M+1]k_\nu) \text{sen}(Mk_\nu)}{2 \text{sen}(k_\nu)} + \frac{\cos(2[M+1]k_\nu) \text{sen}(2Mk_\nu)}{8 \text{sen}(2k_\nu)}. \end{aligned}$$

Nuevamente, un breve análisis nos lleva a concluir que para cualquier k_ν , el segundo término de esta expresión es igual a $+1/2$, mientras que el último es igual a

$$\frac{1}{8} \underbrace{\cos(2\nu\pi)}_1 \underbrace{\frac{\text{sen}(2\nu M\pi/[M+1])}{\text{sen}(2\nu\pi/[M+1])}}_{-1} = -1/8.$$

Por lo tanto,

$$\sum_n^M u_n^4 = \frac{3}{8}(M+1). \quad (\text{A.9})$$

Usando (4.2) y (A.9) obtenemos

$$R = \frac{(\sum_n |u_n|^2)^2}{\sum_n |u_n|^2} = \frac{\frac{1}{4}(M+1)^2}{\frac{3}{8}(M+1)} = \frac{2}{3}(M+1). \quad (\text{A.10})$$

Referencias

- [1] E. Fermi, J. Pasta y S. Ulam, Los Alamos Report **I**, 1940 (1955).
- [2] M. J. Ablowitz y H. Segur, *Solitons and the Inverse Scattering Transform* (SIAM, 1981).
- [3] A. J. Sievers y S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
- [4] E. Trias, J. J. Mazo y T. P. Orlando, Phys. Rev. Lett. **84**, 741 (2000).
- [5] D. N. Christodoulides, F. Lederer y Y. Silberberg, Nature **424**, 817 (2003).
- [6] A. S. Davydov, J. Theoret. Biol. **38**, 559 (1973).
- [7] P. G. Kevrekidis, *The Discrete Nonlinear Schroedinger Equation: Mathematical Analysis, Numerical Computations and Physical Perspectives* (Springer, 2009).
- [8] S. Flach y A. V. Gorbach, Physics Reports **467**, 1 (oct. 2008).
- [9] A. L. Jones, J. Opt. Soc. Am. **55**, 261 (1965).
- [10] S. Somekh, E. Garmire, A. Yariv, H. L. Garvin y R. G. Hunsperger, Appl. Phys. Lett. **22**, 46 (1973).
- [11] D. N. Christodoulides y R. J. Joseph, Opt. Lett. **13**, 794 (1988).

- [12] F. Lederer, G. I. Stegeman, D. N. Christodoulides, G. Assanto, M. Segev y Y. Silberberg, *Physics Reports* **463**, 1 (jul. 2008).
- [13] H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A. R. Boyd y J. S. Aitchison, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3383 (1998).
- [14] H. J. Metcalf y P. van der Straten, *Laser cooling and trapping* (Springer-Verlag, 1999).
- [15] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii y S. Stringari, *Reviews of Modern Physics* **71**, 463 (1999).
- [16] O. Morsch y M. Oberthaler, *Reviews of Modern Physics* **78**, 179 (feb. 2006).
- [17] K. B. Davis, M. O. Mewes, N. J. Andrews, M. R. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn y W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [18] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman y E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [19] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler y T. Pfau, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 16 (abr. 2005).
- [20] B. Fröhlich, *Strong Dipolar Effects in a Chromium Bose-Einstein Condensate*, Tesis Doctoral, Universität Stuttgart (2007).
- [21] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein y T. Pfau, *Reports on Progress in Physics* **72**, 12 (2009).
- [22] P. Pedri y L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 20 (nov. 2005).
- [23] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 5 (1958).

- [24] D. J. Thouless, Phys. Rep. **13**, 93 (1974).
- [25] F. Wegner, Z. Phys. B **25**, 327 (1976).
- [26] B. Kramer y A. MacKinnon, Reports on Progress in Physics **56**, 1469 (1993).
- [27] T. Pertsch, U. Peschel, J. Kobelke, K. Schuster, H. Bartelt, S. Nolte, A. Tünnermann y F. Lederer, Phys. Rev. Lett. **93**, 5 (jul. 2004).
- [28] Y. Lahini, A. Avidan, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, D. Christodoulides y Y. Silberberg, Phys. Rev. Lett. **100**, 013906 (ene. 2008).
- [29] Y. Lahini, R. Pugatch, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, N. Davidson y Y. Silberberg, Phys. Rev. Lett. **103**, 013901 (jun. 2009).
- [30] L. Guidoni, C. Triché, P. Verkerk y G. Grynberg, Phys. Rev. Lett. **79**, 3363 (nov. 1997).
- [31] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer y A. Aspect, Nature **453**, 891 (jun. 2008).
- [32] J. Lye, L. Fallani, C. Fort, V. Guarrera, M. Modugno, D. Wiersma y M. Inguscio, Phys. Rev. A **75**, 061603 (jun. 2007).
- [33] S. Flach, D. Krimer y C. Skokos, Phys. Rev. Lett. **102**, 024101 (ene. 2009).
- [34] C. Skokos, D. Krimer, S. Komineas y S. Flach, Phys. Rev. E **79**, 056211 (mayo 2009).
- [35] R. A. Vicencio, M. I. Molina y Y. S. Kivshar, Phys. Rev. E **71**, 056613 (2005).
- [36] W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **77**, 3695 (1996).

- [37] O. Penrose, *Phyl. Mag.* **42**, 1373 (1951).
- [38] N. Bogoliubov, *J. Phys. USSR* **11**, 23 (1947).
- [39] I. Bloch, *Nature* **1**, 23 (2005).
- [40] J. M. Ziman, *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids* (Oxford University Press, 1960).
- [41] V. Letokohov y V. Minogin, *Phys. Lett.* **61A**, 370 (1977).
- [42] W. Zwerger, *J. Opt. B* **5**, 9 (2003).
- [43] W. Kohn, *Phys. Rev.* **115**, 809 (1959).
- [44] A. Smerzi y A. Trombettoni, *Phys. Rev. A* **68**, 2 (ago. 2003).
- [45] M. J. Steel y W. Zhang, e-print cond-mat/9810284 (1998).
- [46] C. Chin, P. Julienne y E. Tiesinga, *Reviews of Modern Physics* **82**, 2 (abr. 2010).
- [47] C. Cohen-Tannoudji, *Atom-Atom Interactions in Ultracold Quantum Gases* (2007).
- [48] P. O. Fedichev, M. W. Reynolds y G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2921 (sep. 1996).
- [49] M. Theis, G. Thalhammer, K. Winkler, M. Hellwig, G. Ruff, R. Grimm y J. H. Denschlag, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 123001 (sep. 2004).
- [50] M. Mehring, *Principles of High Resolution NMR in Solids* (Springer, 1983).
- [51] C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance* (Springer, 1996).

- [52] C. Menotti, M. Lewenstein, T. Lahaye y T. Pfau, *Dynamics and Thermodynamics of systems with long range interactions: theory and experiments* (American Institute of Physics, 2008).
- [53] W. Krolikowski, O. Bang, J. Rasmussen y J. Wyller, Phys. Rev. E **64**, 016612 (jun. 2001).
- [54] S. Sinha y L. Santos, Phys. Rev. Lett. **99**, 140406 (oct. 2007).
- [55] B. Baizakov, F. K. Abdullaev, B. Malomed y M. Salerno, J. Phys. B **42**, 175302 (2009).
- [56] C. Wang, P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis y B. A. Malomed, Physica D: Nonlinear Phenomena **240**, 9-10 (abr. 2011).
- [57] F. K. Abdullaev, B. Baizakov, S. Darmanyan, V. Konotop y M. Salerno, Phys. Rev. A **64**, 4 (sep. 2001).
- [58] S. Rojas-Rojas, R. A. Vicencio, M. I. Molina y F. K. Abdullaev, Phys. Rev. A **84**, 3 (sep. 2011).
- [59] Y. S. Kivshar y D. K. Campbell, Phys. Rev. E **48**, 3077 (1993).
- [60] F. Lederer, S. Darmanyan y A. Kobayakov, *Spatial Solitons* (Springer-Verlag, 2001).
- [61] Y. S. Kivshar y G. P. Agrawal, *Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals* (Academic Press, 2003).
- [62] M. J. Ablowitz y J. F. Ladik, J. Math. Phys. **16**, 598 (1975).
- [63] L. D. Faddeev y L. A. Takhtajan, Vsp. Mat. Nauk. **34**, 13 (1979).

- [64] Y. S. Kivshar y M. Salerno, Phys. Rev. E **49**, 3543 (1994).
- [65] Y. Kivshar y M. Peyrard, Phys. Rev. A **46**, 3198 (1992).
- [66] M. Salerno, Phys. Rev. A **46**, 5856 (1992).
- [67] B. B. Baizakov, A. Bouketir, A. Messikh y B. A. Umarov, Phys. Rev E **79**, 046605 (2009).
- [68] R. Carretero-Gonzalez, J. D. Talley, C. Chong y B. A. Malomed, Physica D **216**, 77 (2006).
- [69] R. A. Vicencio y M. Johansson, Phys. Rev. E **73**, 046602 (2006).
- [70] M. I. Molina, Phys. Rev. B **60**, 2276 (1999).
- [71] M. I. Molina, Phys. Rev. B **67**, 054202 (2003).
- [72] M. I. Molina, Phys. Rev. B **71**, 035404 (2005).
- [73] M. I. Molina, R. A. Vicencio y Y. S. Kivshar, Phys. Lett. A **350**, 134 (2006).
- [74] M. I. Molina, Phys. Rev. B **74**, 045412 (2006).
- [75] L. Morales-Molina y R. A. Vicencio, Opt. Lett. **31**, 7 (abr. 2006).
- [76] M. I. Molina y Y. S. Kivshar, Opt. Lett. **33**, 9 (mayo 2008).
- [77] A. J. Martínez, R. A. Vicencio y M. I. Molina, Phys. Rev. A **82**, 053820 (nov. 2010).
- [78] M. Öster, M. Johansson y A. Eriksson, Phys. Rev. E **67**, 5 (mayo 2003).

- [79] R. A. Vicencio, *Dinámica controlada de solitones discretos*, Tesis Doctoral, Universidad de Chile (2004).
- [80] M. I. Molina, R. A. Vicencio y Y. S. Kivshar, *Opt. Lett.* **31**, 11 (jun. 2006).
- [81] R. A. Vicencio y S. Flach, *Phys. Rev. E* **79**, 016217 (ene. 2009).
- [82] D. Krimer y S. Flach, *Phys. Rev. E* **82**, 046221 (oct. 2010).
- [83] U. Naether, S. Rojas-Rojas, A. J. Martínez, S. Stützer, A. Tünnermann, S. Nolte, M. I. Molina, R. A. Vicencio y A. Szameit, enviado a publicación (2012).
- [84] L. Morales-Molina y E. Arévalo, *Phys. Rev. A* **82**, 1 (jul. 2010).
- [85] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L. D. Carr, Y. Castin y C. Salomon, *Science* **296**, 5571 (2002).